

Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

Grégory HANNEBIQUE

le : mardi 9 avril 2013

Titre :

Etude de la structure des flammes diphasiques
dans les brûleurs aéronautiques

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

CERFACS

Directeur(s) de Thèse :

Bénédicte CUENOT

Eleonore RIBER

Rapporteurs :

Olivier COLIN

Epaminondas MASTORAKOS

Membre(s) du jury :

Nicolas BERTIER

Fabrice LEMOINE

Denis VEYNANTE

Matthieu RULLAUD

Numéro d'ordre : xxxx

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

École doctorale: MEGEP

Spécialité: Dynamique des Fluides

Directeur de thèse: Bénédicte CUENOT

Co-Directeur de thèse: Eleonore RIBER

Par **Grégory HANNEBIQUE**

Etude de la structure des flammes diphasiques dans les brûleurs aéronautiques

Soutenance prévue le 9 avril 2013 devant le jury composé de:

Olivier COLIN	Chargé de recherche, IFPE	Rapporteur
Epaminondas MASTORAKOS	Professeur, Université de Cambridge	Rapporteur
Nicolas BERTIER	Chargé de recherche, ONERA	Examineur
Fabrice LEMOINE	Professeur, LEMTA Université de Lorraine	Examineur
Denis VEYNANTE	Directeur de recherche, EM2C Ecole centrale Paris	Examineur
Matthieu RULLAUD	Docteur Ingénieur, SNECMA Villaroche	Invité
Bénédicte CUENOT	Chercheur CERFACS	Directeur de thèse

Réf. CERFACS : TH/CFD/13/21

Table des matières

Resume	10
Abstract	12
Liste des Figures	23
Liste des Tableaux	26
Chapitre 1: Introduction	
1 Contexte environnemental	28
1.1 Formations des polluants	28
2 Contexte industriel.	29
2.1 Principe d'une turbine à gaz	30
2.2 Technologie des turbines à gaz aéronautiques.	30
3 Combustion turbulente diphasique	36
3.1 Couplage Spray/Turbulence	38
3.2 Couplage Combustion /Turbulence	39
3.3 Couplage Spray/Combustion : régime de combustion diphasique.	39

PARTIE I MODÈLES ET ÉQUATIONS POUR LES ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES RÉACTIFS

Chapitre 2: Description et modèles pour la phase gazeuse

1	Équations de conservation et loi d'état	48
2	Thermodynamique des gaz	49
2.1	Équation d'état des gaz parfaits	49
2.2	Phénomènes diffusifs	49
3	La Turbulence	51
3.1	D'où vient la turbulence?	51
3.2	Un phénomène multi-échelles	52
3.3	Approche numérique de la Turbulence	52
4	Combustion	55
4.1	Généralités sur les régimes de combustion	55
4.2	Chimie	57
4.3	Modélisation de la combustion turbulente	60

Chapitre 3: Equations de conservation pour la phase dispersée

1	Le formalisme Lagrangien	69
1.1	Equations de Basset-Boussinesq-Oseen	69
1.2	Force de traînée de Stokes	71
1.3	Interaction entre la phase porteuse et la phase dispersée	72
1.4	Evaporation d'une particule isolée	74
2	Le formalisme Eulérien mésoscopique	79
2.1	De l'équation de Boltzmann vers celle d'Enskog	80
2.2	Equations de conservation	83
2.3	Fermeture des termes décorrélés	85
2.4	Modèle de sous maille pour la phase dispersée	87
2.5	Modèle de flamme épaissie diphasique de Boileau (2007)	87

Chapitre 4: Modélisation de l'injection des atomiseurs swirlés

1	FIM-UR : un modèle d'injection pour les atomiseurs swirlés	92
1.1	Présentation du modèle FIM-UR.	92
1.2	Modèle Lagrangien	94
1.3	Modèle Eulérien	95
2	Améliorations du modèle FIM-UR de Sanjosé (2009)	103
2.1	Evaluation du débit liquide	104
2.2	Calcul de l'entraînement d'air	105
2.3	Profils en entrée	106
3	Présentation de la configuration de validation.	109
3.1	Configuration de Yang et al. (2003).	109
3.2	Point de fonctionnement.	109
3.3	Géométries calculées, maillages et conditions aux limites	111
3.4	Conditions aux limites	111
3.5	Caractéristiques des simulations réalisées	113
4	Résultats	114
4.1	Simulations Lagrangiennes	114
4.2	Simulations Eulériennes.	129
5	Conclusion.	133

Chapitre 5: Impact de la polydispersion sur la dynamique et l'évaporation des sprays

1	Définition des diamètres caractéristiques d'un spray	141
2	La Turbulence Homogène Isotrope	143
2.1	Généralités	143
2.2	Analyse dans l'espace spectral.	144
2.3	Initialisation de l'écoulement gazeux en THI	147
3	Validation sur un cas de référence monodisperse	148
3.1	Cas de référence.	149
3.2	Nombre de Stokes et concentration préférentielle	149
3.3	Résultats.	150
4	THI chargées en particules avec différentes distributions de taille	151
4.1	Méthodologie	151

4.2	Choix des diamètres de gouttes et cas simulés	152
5	Résultats sur la dynamique	154
5.1	Ségrégation.	154
5.2	Force de traînée	160
6	Evaporation d'un spray pour différentes distributions de taille	163
6.1	Méthodologie	163
6.2	Diamètres issus de la littérature des lits fluidisés	163
6.3	Cas simulés	165
6.4	Résultats.	165
7	Conclusion.	167

PARTIE II IMPACT DE LA TAILLE DE GOUTTE ET COMPARAISONS DES FORMALISMES POUR LA PHASE DISPERSÉE

Chapitre 6: Impact de la taille des gouttes et comparaison des formalismes pour la phase dispersée dans la configuration MERCATO

1	Présentation du banc expérimental	176
1.1	Point de fonctionnement et données expérimentales	177
1.2	Simulations réalisées.	177
1.3	Grandeurs caractéristiques de l'écoulement	179
2	Méthode numérique	180
2.1	Description du domaine numérique et des maillages	180
2.2	Conditions aux limites	182
2.3	Initialisation.	182
2.4	Modèles utilisés.	183
3	Topologie de l'écoulement diphasique réactif	183
3.1	Dynamique de la phase gazeuse	183
3.2	Dynamique de la phase liquide.	188
3.3	Interaction spray-flamme	191
4	Structure de flamme.	200
4.1	Analyse qualitative.	200

4.2	Analyse quantitative.	203
5	Premiers résultats avec l'approche Euler-Euler	211
5.1	Méthode numérique.	211
5.2	Analyse de l'écoulement transitoire, de l'allumage à la flamme stabilisée	216
5.3	Topologie de l'écoulement diphasique réactif et structure de flamme.	220
6	Conclusion.	222
Conclusion		226
Annexe A : Article from Flow, Turbulence and Combustion		245
Annexe B : MERCATO : Champs supplémentaires		267

Résumé

La régulation des polluants a mené à la création de nouveaux systèmes de combustion. Le carburant étant stocké sous forme liquide, sa transformation jusqu'à sa combustion est complexe. La capacité de la Simulation aux grandes échelles à simuler des écoulements turbulents réactifs a été montrée sur des cas académiques comme sur des configurations industrielles, tout en prenant en compte les phénomènes multiphysiques intervenant dans ces configurations, mais les études sur la structure de flamme diphasique sont encore trop peu nombreuses. La présence de deux solveurs pour la simulation d'une phase liquide étant disponible dans le code AVBP, leur utilisation permet une comparaison et une compréhension des phénomènes en jeu combinant dispersion, évaporation, et combustion.

La première partie de l'étude relate la validation du modèle d'injection FIM-UR. Ce modèle est capable de reconstruire les profils de vitesses et de granulométrie à l'injecteur sans avoir à simuler les phénomènes d'atomisations primaire et secondaire. Une validation en régime turbulent avait déjà été réalisée, et on propose ici de valider le modèle dans un cas laminaire. Des comparaisons entre simulations monodisperses et polydisperse et des expériences sont effectuées. La simulation monodisperse Lagrangienne donne une bonne structure globale mais la simulation polydisperse Lagrangienne permet de retrouver le comportement au centre du cône avec la présence des petites gouttes et à la périphérie du cône par la présence des grosses gouttes. De plus, des améliorations sont apportées au modèle pour le formalisme Eulérien et montrent de bons résultats.

La partie suivante s'intéresse à évaluer l'impact de la polydispersion. En effet, au cas où une approche polydisperse n'est pas possible, le choix du diamètre moyen à prendre pour une simulation monodisperse est délicat. On propose donc d'analyser le comportement d'un spray polydisperse en le comparant à ceux de sprays monodisperses. Deux configurations académiques sont choisies : des cas de Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules pour étudier la dynamique, et des calculs d'évaporation 0D. Trois paramètres sont étudiés pour la dynamique : la concentration préférentielle (ou ségrégation), la traînée moyenne et la traînée réduite moyenne. Cette dernière et la ségrégation de la distribution polydisperse semblent affectées par les tailles de goutte les plus faibles, et la concentration préférentielle apparaît alors comme la moyenne des ségrégations des classes qui la composent pondérées par l'inverse du nombre de Stokes associé à chacune de ces classes. La traînée moyenne de la simulation polydisperse possède un comportement proche des diamètres moyens D_{10} et D_{20} . Ces analyses nous poussent donc à choisir le D_{10} pour caractériser la dynamique d'un spray polydisperse. Les calculs d'évaporation 0D ne permettent pas dans un premier temps de caractériser efficacement la masse évaporée d'un spray polydisperse par celle d'un spray monodisperse équivalent, mais la définition de nouveaux diamètres issus de la littérature des lits fluidisés comme le $D^{50\%}$ le permet, ce qui le place autour du D_{32} . On propose donc de caractériser l'évaporation d'un spray polydisperse par ce diamètre.

Enfin, la dernière partie étudie la structure de flamme diphasique dans la chambre MERCATO,

à l'aide du formalisme Lagrangien, monodisperse et polydisperse, mais aussi en utilisant le formalisme Eulérien. La validation du modèle FIM-UR du premier chapitre et ses améliorations sont utilisées pour représenter les conditions d'injection liquide. En plus d'un calcul polydisperse, deux simulations monodisperses Lagrangiennes sont réalisées en prenant les diamètres moyens D_{10} et D_{32} , suite à la partie précédente. Des comparaisons qualitatives et des validations sont réalisées, en comparant des profils de vitesses gazeuses axiale et fluctuante et vitesse axiale liquide issus de l'expérience. De bons résultats sont trouvés et le diamètre D_{32} semble plus proche des profils de la distribution polydisperse. Une comparaison de la flamme moyenne avec transformée d'Abel issue de l'expérience montrent des caractéristiques similaires : la flamme a une forme en M, accrochée par des zones de recirculation en sortie de swirler et par un point d'ancrage au niveau de la zone de recirculation centrale pour les trois simulations.

Enfin, l'impact de la taille des gouttes est étudié. Même si quelques grosses gouttes de la distribution polydisperse se retrouvent dans les gaz brûlés au vu de leurs temps particulière et temps d'évaporation plus grands, les structures de flamme diphasique restent similaires. Une combinaison entre des flammes de prémélange et des poches de carburant qui brûlent en diffusion est observée. La distribution de température en fonction de la fraction de mélange présente des similarités pour les différentes simulations puisqu'elle est encadrée par des droites de même pente. Là aussi, le diamètre D_{32} caractérise mieux la structure de flamme de la distribution polydisperse. Ce constat permet de réaliser les premiers calculs Eulériens en utilisant ce diamètre. L'étude met en évidence un scénario définissant l'allumage transitoire, réalisé par une méthode grossière, et pointe les différences entre les formalismes en termes de convergence statistique. L'étude de la structure de flamme diphasique présente des différences concernant le mélange et la combustion, même si les mêmes régimes de combustion sont présents. Des pistes comme la fermeture du terme d'évaporation en LES, ou la méthodologie d'allumage sont envisagées pour expliquer ces différences.

Mots clés : Simulations au grandes échelles, injection diphasique, Turbulence Homogène Isotrope, Structure de flamme, Euler/Euler, Euler/Lagrange

Abstract

Regulations on pollutants have led to the creation of new combustion systems. Giving that fuel is stored in a liquid form, its evolution until combustion is complex. The ability of Large Eddy Simulation has been demonstrated on academic cases, as well as on industrial configurations, by taking into account the multi-physics phenomena, but there is a lack of studies about two-phase flow flame structures. Two solvers for the simulation of two-phase flows are available in the AVBP code, hence both simulations are performed to compare and increase understanding of the phenomena involved such as dispersion, evaporation and combustion.

The first part of the study focuses on the validation of the FIM-UR injection model. This model is able to build velocity and droplet profiles at the injector, without simulating primary and secondary break up. A validation in a turbulent case has already been done, and this study validates the model in a laminar case. Comparisons between monodisperse and polydisperse simulations, and experiments are performed. The monodisperse Lagrangian simulation shows good results but the polydisperse simulation is able to represent profiles in the center of the cone by small droplets and at the peripheral part of the cone, by big ones. Moreover, improvements in the Eulerian model exhibit good results.

The next section tries to evaluate the impact of polydispersion. Indeed, when a polydisperse approach is not available, choosing the mean diameter can be tricky. A comparison between the behavior of polydisperse spray and monodisperse sprays ones is realised. Two academic cases are studied: Homogeneous Isotropic Turbulence with particles to analyze the dynamics, and 0D evaporation cases. For the dynamics, preferential concentration, mean drag and reduced mean drag are studied. The latter and preferential concentration are affected by small droplets, and the preferential concentration of a polydisperse spray is equivalent to the average of preferential concentration of classes, extracted from the polydisperse distribution, weighted by the inverse of the Stokes number of each class. The mean drag behaves like the D_{10} and D_{20} mean drags. This analysis allows us to choose the D_{10} to characterize a polydisperse distribution for the dynamics. Zero-D evaporation simulations cannot characterize the polydisperse spray evaporated mass by the evaporated mass of monodisperses sprays. New definitions of diameters from fluidized bed literature enable the use of $D^{50\%}$, which is close to D_{32} . We propose to use this diameter to characterize the evaporation of a polydisperse spray.

Finally, the last section studies the structure of two-phase flames in the MERCATO bench, using the Lagrangian formalism, monodisperse and polydisperse but also using the Eulerian formalism. The validation of FIM-UR model and improvements from the first section are used to represent liquid injection conditions. A polydisperse simulation is realized and two monodisperse simulations are computed using mean diameters D_{10} and D_{32} , thanks to the previous section. Qualitative comparisons and validations are realized, comparing gaseous velocity profiles and liquid velocity profiles. Good agreements are found and the mean diameter D_{32} seems to be close to the poly-

disperse spray. A comparison between mean flames is done with an Abel transform of the flame from the experiments. The flame has an "M shape", anchored by small recirculation zones out of the swirler, and by a point at the tip of the central recirculation zone.

Then, the impact of droplet distributions is analyzed. Even if few bigger droplets from the polydisperse distribution are convected in the hot gases due to bigger particular time and evaporation time, two-phase flow flame structures are equivalent. Different combustion regimes appeared with premixed flames and pockets of fuel burning in the hot gases. The scatterplot of the temperature versus the mixture fraction present some similarities for all the simulations and is framed by same slope lines. Moreover, the mean diameter D_{32} characterizes the polydisperse spray in terms of flame structure. This result enables the first Eulerian simulations and focuses on the impact of the unphysical transient ignition. Moreover, discrepancies between Lagrangian and Eulerian formalisms are presented concerning statistical convergence. The two-phase flow flame structure indicates discrepancies regarding mixing and combustion, even if premixed and non premixed combustion regimes are still present. Such differences may be explained by the LES evaporation closure term or by the ignition procedure.

Keywords: Large Eddy Simulations, two-phase flow injection, Isotropic Homogeneous Turbulence, Flame Structure, Euler/Euler, Euler/Lagrange

Remerciements

Longtemps je ne m'attardais qu'à lire les pages de remerciements des anciens doctorants, afin de mieux comprendre leur état d'esprit, et les connaître au travers des quelques lignes qu'ils laissaient. C'est maintenant à mon tour d'écrire des remerciements qui finaliseront ce manuscrit de thèse.

Je remercie le Jury: d'abord, **Epaminondas Mastorakos** et **Olivier Colin**; sachez que si la lecture du manuscrit vous a été difficile, sa rédaction l'a été tout autant. Merci d'avoir pris le temps d'évaluer le travail de ces 3 années. Enfin merci aux autres membres du Jury: **Nicolas Bertier**, **Fabrice Lemoine**, **Matthieu Rullaud** et **Denis Veynante**. Merci d'être venus me tester et poser des questions lors de ma soutenance.

Je remercie ensuite mes encadrantes: **Bénédicte Cuenot** et **Eleonore Riber**; merci pour votre soutien, et vos apports scientifiques, tout particulièrement pendant la phase de rédaction. Merci de m'avoir aidé à améliorer le manuscrit (c'était nécessaire...!).

Je remercie aussi **Thierry Poinso**t pour son accueil dans l'équipe CFD. Les seniors ne sont pas en reste, je remercie **Antoine**, **Florent**, **Laurent**, **Olivier** et **Pablo** (pour les bières!), et **Jérôme** (senior toi? c'te blague...). Merci pour votre disponibilité quant aux discussions relatives à vos spécialités respectives.

Merci à l'équipe CSG pour m'avoir systématiquement dépanné. Merci aux assistantes et au service administratif pour leurs aides.

Je remercie ensuite les anciens thésards, et potes devenus docteurs: **Jorge Amaya** pour les faux statuts Facebook, **Olivier Cabrit** pour les génériques de dessins animés et "No Worries mates", **Sabrina Dubuc** pour les mojitos, **Philippe Estival** pour les discussions très inspirées, **Alexandre Eyssartier** pour le Skytoss en late game, **Benedetta Franzelli** pour ta bonne humeur, **Frichouille** pour voir ta tête le lendemain de soirée, **Marta Garcia** pour avoir codé le Lagrangien (mille mercis!), **Victor Granet** pour le foot et av2scatterplot, **Thomas Guedeney** pour le streetview rue réclusane, **Elsa Gullaude** pour ne pas arrêter de parler de Bubu, **Ignacio "Nacho" Hernandez** pour l'accent hispano ch'ti y las bromas madrileñas, **Felix Jaegle** pour m'avoir encadré à mes débuts bancaires, **Stéphane Jauré** pour l'interpolateur, **Pawel Kozolub**, **Jakub Bibrzycki** et **Lukasz Kuban** pour la vodka polonaise, **Matthias Kraushaar** pour les blagues de merde, **Nicolas Lamarque** pour ta disponibilité et ta franchise, **Guillaume Lecocq** pour les vidéos et les entraînements de BF, **Ali Najafiyazdi** pour tes surnoms, **Alexandre Neophy-**

tou pour ta rigueur et ton expression faciale "bouche bée", **JF Parmentier** pour ta grande culture du Hard Rock, **François "Peck" Pecquery** pour la baignade glacée à Porticcio, **Thomas Pedot** pour les débats agités, **Damien Poitou** pour les scripts "python-awk-bash-tcsh" et les délires (avec Christelle un peu aussi), **Julien Richard** pour la rhétorique sans faille, **Anthony Roux** pour les blagues cinglantes, **Anthony Ruiz** pour les uppercuts au menton, **Marlène Sanjosé** pour FIM-UR et les conseils de la post doc éclairée!, **Thomas Schmitt** pour ta bonne humeur (pareil que Beni), **Jean Matthieu Senoner** pour ta compréhension du diphasique, **Patricia Sierra-Sanchez** pour l'Evap, **Camillo Silva** pour les fourmis en apéro, **Javier Urzay** pour Dirty Harry (GFY), **Aymeric Vié** pour l'idée du chapitre 5, **Pierre Wolf** pour les binouzes au Delirium de Bruxelles.

Un merci (et surtout bonne chance!) à la nouvelle génération: **Lucas, Corentin, Raph, Damien, Sandrine, Anthony, Michael, Laure, Pierre, Sophie, Jérôme.**

Les potes du CERFACS: **Pierre**, la fashion victim dit 'Beckham', **Mario** 'Tapeto' dit 'Je suis mafia', **Ignacio** 'Schrodinger man' , **Abdulloch** alias 'Obfa Mobfa Stoltzes Obfa', **David** alias 'petit musclé' alias 'Davidator' alias 'baboulinet', **Rémi** "el hombre de la noche" (je pars en vacances en été, tu surveilles ma maison des voleurs?), **Jean Phi** 'Kuma san' (merci encore pour Hello Kitty), **Geof** dit "machine gun tchaussnett" (tu sais pourquoi*...). Enfin, **Basti**, merci pour tout (je ne m'éternise pas, les gens pensent déjà qu'on est pacsé...)

Enfin les potes hors CERFACS, merci à **Gab, Djé, Cindy, Ious, Josepha** (et la clique de **St Isidore!**), **Marina, Samy, Grotom, Chris, Sam, Sylvie, Tieno, Ophé, Maia, Tonio, Emilie, Cum Cum, Marion, JeJess, Quentin, Anais, Toinou, Vaness, Maxou, Sad, Gaet, Jean, Mc-Tendu, Tom, Yo, Jérém, Dewi, Zola, Loussia**, et à l'équipe de Blagnac pour les apéros après l'entraînement (et l'entraînement).

Merci à tout ceux que j'oublie.

Enfin, un énorme merci à ma famille et mes amis pour leur aide, leur support, et pour m'avoir apporté le recul et la force nécessaires à l'écriture de ce manuscrit.

Liste des figures

1.1	Production de polluants en fonction de la température des gaz brûlés (Lefebvre (1999))	29
1.2	Schéma du cycle de Brayton (a) et représentation dans un diagramme h-s (b)	30
1.3	Schéma d'une turbine à gaz (a) et d'une chambre de combustion (b)	31
1.4	Visualisation du PVC, par isosurface de pression à 99500 Pa (Wang et al. (2007)) .	32
1.5	Schéma des différents types de tourbillonneurs et écoulement induit (Winterfeld et al. (1990))	32
1.6	Schéma d'un injecteur simplex (a) et d'un injecteur air blast (b)	33
1.7	Comparaison des distributions en taille de gouttes : (a) log normale, Rosin Ramm- ler et expérience pour un injecteur simplex (Senoner (2010)) ; (b) log log normal et expérience pour un injecteur bi-modal (deux pics) (Zhu (2010))	34
1.8	Schéma présentant l'intérêt de la méthode RQL, extrait de Lefebvre (2010)	35
1.9	Schéma présentant le LM6000 de General Electrics, extrait de Joshi et al. (1994) .	36
1.10	Représentation du couplage entre la combustion, la turbulence et le spray	37
1.11	Comparaison entre les différentes méthodes numériques dans un statoréacteur (Roux (2009))	38
1.12	Diagramme des régimes de combustion prémélangée extrait de Huang and Yang (2009), v' représente la vitesse de l'écoulement, S_L la vitesse laminaire de flamme .	40
1.13	Régimes de combustion diphasique, d'après la classification de Chiu et al. (1982) .	41
1.14	Représentation des régimes de combustion diphasique par Réveillon and Vervisch (2005) : trait plein pour combustion prémélangée, trait discontinu pour combustion non prémélangée	42
2.1	Représentation conceptuelle des différentes échelles de la théorie de la cascade d'énergie	53

2.2	Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et LES (b.) pour une Turbulence Homogène Isotrope	54
2.3	Combustion prémélangée (a) et non prémélangée (b), avec un bec Bünsen	56
2.4	Diagramme température (a) et fraction massique de carburant (b) en fonction de la fraction de mélange, pour une chimie infiniment rapide irréversible	57
2.5	Vitesse de flamme laminaire (a) et de température adiabatique de fin de combustion (b) pour le schéma 2S_KERO_BFER et le schéma détaillé de référence (Franzelli et al. (2010))	60
2.6	Effet sur le plissement de la flamme du modèle de flamme épaissie a) Flamme non épaissie b) Flamme épaissie, extrait de Poinso et Veynante (2011)	61
3.1	Schéma représentant le phénomène d'injection	66
3.2	Simulation du processus d'injection par une méthode suivi d'interface (Menard et al. (2007))	67
3.3	Comparaison des deux formalismes (a.) Euler/Lagrange (b.) Euler/Euler mésoscopique pour un jet plan 2D anisotherme (Dombard (2011))	68
3.4	Comparaison des deux formalismes (a.) Euler/Lagrange (b.) Euler/Euler mésoscopique pour l'injection multipoint dans la chambre TLC (Jaegle et al. (2010))	69
3.5	Schéma des contributions au flux de chaleur autour d'une goutte	77
3.6	Evolution temporelle de surface de goutte adimensionnée de C_7H_{16} à $T_g = 423K$, $P_g = 1bar$ (Sierra (2012))	80
3.7	Interprétation schématique des grandeurs mésoscopique et décorrélée	82
3.8	Comparaison des deux formalismes : (a) Euler/Lagrange projeté sur une grille Eulérienne (b.) Euler/Euler mésoscopique pour différents modèles d'énergie décorrélée (Sierra, 2012)	86
4.1	Schéma d'une coupe de l'injecteur :de profil (a) et de face (b)	92
4.2	Schéma de principe du modèle FIM-UR, et des paramètres nécessaires à sa mise en place (Sanjosé et al. (2011))	93
4.3	Principe du modèle FIM-UR pour le formalisme Lagrangien	94
4.4	Modèle FIM-UR. Profils de vitesses liquides axiale, tangentielle, et radiale, et de fraction volumique liquide imposés en sortie d'injecteur dans le formalisme Lagrangien (Sanjosé et al. (2011))	95
4.5	Principe du modèle FIM-UR pour le formalisme Eulérien	96

4.6	Principes du modèle FIM-UR pour le formalisme Eulérien : déplacement des profils calculés en $x = x_i$ à la position $x = x_0$	97
4.7	Modèle FIM-UR. Profils de vitesses liquides axiale, tangentielle, et radiale, et de fraction volumique liquide imposés dans le formalisme Eulérien (Sanjosé et al. (2011))	97
4.8	Modèle FIM-UR. Projection de la composante orthoradiale du plan $x = x_0$ sur le plan $x = x_i$ (Sanjosé (2009))	98
4.9	Modèle FIM-UR. Représentation des fonctions auto-similaires f et ϕ pour les vitesses axiales liquide et gazeuse et pour la fraction volumique liquide (Sanjosé (2009))	101
4.10	Fonctions auto-similaires f et ϕ pour la vitesse axiale liquide et la fraction volumique liquide. Comparaison entre le modèle d'origine de Sanjosé (2009) (a) et le présent travail (b)	106
4.11	Profils d'entraînement d'air supposés en $x = x_i$: comparaison entre le modèle d'origine de Sanjosé (2009) et le présent travail	107
4.12	Vitesse axiale liquide en $x = x_i$: comparaison entre le modèle d'origine de Sanjosé (2009) et le présent travail	108
4.13	Représentation du domaine de calcul et positions axiales des plans de mesures de Yang et al. (2003)	110
4.14	Différents types d'injecteurs utilisés par Yang et al. (2003)	110
4.15	Distribution de tailles de goutte utilisée pour la calcul polydisperse, les traits continus séparent la distribution en différentes classes : (a) Distribution numérique ; (b) Distribution volumique (le trait continu à $60 \mu m$ représente aussi le diamètre des calculs monodisperses)	112
4.16	Représentation des différences géométriques pour l'injecteur	113
4.17	Coupe médiane des différents maillages	114
4.18	Conditions aux limites appliquées dans la configuration de Yang et al. (2003) . . .	115
4.19	Cas EL_Mono. Comparaison qualitative entre des visualisations directes expérimentales latérale (a) et transverse (b), et un champ de particules calculé (c)	116
4.20	Cas EL_Mono. Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; expériences (symboles) et calculs (lignes)	117
4.21	Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) Cas EL_Mono (b). Cas EL_Poly	118

4.22	Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; expériences (symboles), Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EL_Poly (ligne pointillée)	119
4.23	Cas EL_Poly. Champ instantané du paramètre indicateur de particules dans le plan médian du domaine de calcul	120
4.24	Cas EL_Poly. Visualisation de la classe I (entre 0 μm et 30 μm)	120
4.25	Cas EL_Poly. Visualisation de la classe II (entre 30 μm et 60 μm)	121
4.26	Cas EL_Poly. Visualisation de la classe III (supérieures à 60 μm)	121
4.27	Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe I du cas EL_Poly (ligne pointillée)	123
4.28	Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe II du cas EL_Poly (ligne pointillée)	124
4.29	Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe III du cas EL_Poly (ligne pointillée)	125
4.30	Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) Cas EL_Mono (b) Cas EL_Mono_on_meshEE	126
4.31	Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EL_Mono_on_meshEE (ligne pointillée)	128
4.32	Cas EE. Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) visualisation directe expérimentale et (b) fraction volumique liquide dans le plan médian	129
4.33	Cas EE. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EE (ligne continue et symboles blancs)	131
4.34	Cas EE. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur	132
4.35	Cas EE_fine. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EE (ligne continue et symboles blancs) et Cas EE_fine (ligne continue)	134
4.36	Cas EE_fine. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur	136
4.37	Cas EE_fine_mod. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EE_fine (ligne continue) et Cas EE_fine_mod (ligne pointillée)	137
4.38	Cas EE_fine_mod. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur	138

5.1	Comparaison des spectres de Passot-Pouquet et Von Karmann Pao	146
5.2	Spectres d'énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse : en trait plein, spectre analytique; en marqueur noir, spectre de la solution initiale calculée; en pointillés, spectre obtenu après $t_0 = 12.5 \cdot 10^{-5} s$	148
5.3	THI chargée en particules. Illustration du phénomène de concentration préférentielle : (a) champ de vorticit� dans le plan m�dian ; (b) particules dans le plan m�dian	150
5.4	Comparaison de l'�volution temporelle de grandeurs obtenue sur le maillage grossier avec NTMIX (marqueurs noirs) et AVBP (marqueurs blancs) : (a) �nergie cin�tique turbulente, (b) s�gr�gation	151
5.5	Distribution de Rosin-Rammler et diam�tres moyens correspondants	152
5.6	Proportion num�rique (a) et massique (b) des diff�rentes classes de gouttes dans la distribution polydisperse	153
5.7	Impact du maillage sur la s�gr�gation pour les cas D_{10} , D_{20} , D_{21} , D_{30} , D_{31} , D_{32} , D_{43} et RR : (a) maillage grossier ; (b) maillage fin	155
5.8	S�gr�gation par classe extraite de la simulation polydisperse RR	156
5.9	S�gr�gation pour D^6 , D^7 , D^8 , D^9 , D^{10} et RR	157
5.10	S�gr�gation pour D^1 , D^2 , D^3 , D^4 , D^5 et RR	157
5.11	S�gr�gation pour diff�rentes contributions des classes et RR	158
5.12	Poids calcul�s � partir du Stokes de chaque classe, appliqu�s pour chaque classe . .	159
5.13	S�gr�gation obtenue par pond�ration des s�gr�gations issues de D^1 � D^{10} par le Stokes inverse et du cas RR	159
5.14	S�gr�gation obtenue par pond�ration des s�gr�gations issues des cas D^1 , D^2 , D^3 et D^4 et du cas RR	160
5.15	Tra�n�e moyenne au cours du temps pour les diff�rentes simulations : (a) D^i et RR ; (b) D_{ij} et RR	161
5.16	Tra�n�e r�duite moyenne au cours du temps pour les diff�rentes simulations : (a) D^i et RR ; (b) D_{ij} et RR	164
5.17	�volution du diam�tre adimensionn� au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij}	166
5.18	Evolution de la masse adimensionn�e au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij} et polydisperse RR	166

5.19	Évolution de la masse adimensionnée de deux classes de goutte extraites de RR et bornées par des diamètres moyens D_{ij} au cours du temps : (a) classe de goutte 30-40 microns bornée par D_{10} et D_{21} ; (b) classe de goutte 40-50 microns bornée par D_{31} et D_{43}	168
5.20	Évolution de la masse adimensionnée de RR bornée par la classe des diamètres inférieurs à 50 microns et supérieurs à 50 microns au cours du temps	169
5.21	Évolution de la masse adimensionnée de RR comparée à l'évolution de $D^{10\%}$, $D^{50\%}$ et $D^{90\%}$ au cours du temps	169
6.1	Dispositif expérimental du banc MERCATO	176
6.2	Positions axiales des relevés des données expérimentales et visualisation de la flamme par transformée d'Abel (Linassier et al. (2011))	178
6.3	Distribution de Rosin-Rammler reconstruite à partir des données de Linassier et al. (2011) et distributions monodisperses choisies D_{10} et D_{32}	178
6.4	Géométrie du brûleur MERCATO	181
6.5	Coupes du maillage $mercEL$ dans le plan médian	181
6.6	Coupe du maillage $mercEL$ à l'injecteur dans le plan médian	181
6.7	Champ de vitesse axiale gazeuse moyenne dans le plan médian : cas ELD_{10}	184
6.8	Champ de fluctuations de vitesse axiale gazeuse dans le plan médian : cas ELD_{10} .	185
6.9	Champ de vitesse tangentielle moyenne gazeuse dans le plan médian : cas ELD_{10} .	185
6.10	Profils de vitesse gazeuse axiale moyenne dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté)	186
6.11	Profils de vitesse gazeuse axiale fluctuante dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté)	187
6.12	Illustration de la statistique Lagrangienne par superposition des champs instantanés de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$	189
6.13	Profils de vitesse liquide axiale moyenne dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté) ; en $x = 116\text{ mm}$, il n'y pas de gouttes dans les simulations ELD_{10} et ELD_{32} pour évaluer une vitesse liquide.	190

6.14	Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur dans le plan médian (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux dans le plan médian (d) . Cas ELD_{10}	191
6.15	Gouttes colorées par leur température dans une tranche de 1 mm dans le plan médian, obtenues par superposition des distributions instantanées de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$	193
6.16	Gouttes colorées par leur diamètre dans une tranche de 1 mm dans le plan médian, obtenues par superposition des distributions instantanées de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$	194
6.17	Distance de pénétration des gouttes en fonction de leur diamètre d'émission à l'injection dans une solution instantanée : ELD_{10} en trait noir ELD_{32} en trait gris ; $ELRR$ en symboles ; le trait pointillé représente la longueur de flamme moyenne	195
6.18	Comparaison des champs moyens de fraction massique de kérosène dans le plan médian : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} , (c) $ELRR$	196
6.19	Evolution temporelle de masse totale de carburant, masse liquide et masse gazeuse : comparaisons entre les cas ELD_{10} (lignes grises) , ELD_{32} (lignes noires) , et $ELRR$ (symboles)	197
6.20	Comparaison des champs moyens de dégagement de chaleur dans le plan médian avec isoligne de fraction volumique liquide ($\alpha_l = 1e^{-5}$) : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} , (c) $ELRR$ et (d) visualisation directe de la flamme (Linassier et al. (2011))	199
6.21	Champs instantanés de Takeno (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas ELD_{10}	201
6.22	Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a) , champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones blanches de prémélange	202
6.23	Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a) , champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones noires qui brûlent en diffusion	202
6.24	Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a) , champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones de combustion prémélangée et de diffusion	203
6.25	Distributions : (a) Dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange ; (b) Dégagement de chaleur en fonction de la température. Cas ELD_{10}	204

6.26	Distribution de température en fonction de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie, la courbe rouge avec marqueurs représente l'équilibre chimique. . .	206
6.27	Distribution de fraction massique de kérosène en fonction de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie.	207
6.28	Superposition des distributions de température en fonction de la fraction de mélange pour les trois simulations. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie, la courbe rouge avec marqueurs représente l'équilibre chimique.	208
6.29	Champ de variance de la fraction de mélange. Ligne noire : isoligne de fraction volumique liquide à 10^{-4} , ligne grise : isoligne de fraction volumique liquide à 10^{-5} : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$	209
6.30	Distribution de fraction volumique liquide en fonction de la variance de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$	210
6.31	Coupe du maillage <i>mercEE</i> dans le plan médian	212
6.32	Coupe du maillage <i>mercEE</i> dans le plan médian. Détail de la région proche injecteur	212
6.33	Profils de vitesses gazeuse et liquide, et de fraction volumique liquide et taille de goutte issus du modèle FIM-UR Eulérien modifié	214
6.34	Champs instantanés de a.) vitesse axiale gazeuse (la ligne noire représente l'isoligne $u_g = 0 \text{ m.s}^{-1}$), b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux et d.) fraction volumique liquide dans le plan médian, à l'instant de l'allumage grossier $t_{ign} = 5.5 \text{ ms}$	216
6.35	Champs instantanés de a.) vitesse axiale gazeuse (la ligne noire représente l'isoligne $u_g = 0 \text{ m.s}^{-1}$), b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux, d.) fraction volumique liquide, et e.) taux de dégagement de chaleur dans le plan médian, à l'instant $t_{trans} = 12.7 \text{ ms}$	218
6.36	Champs instantanés stabilisés de a.) vitesse axiale gazeuse, b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux et d.) fraction volumique liquide dans le plan médian, $t_{stab} = 45 \text{ ms}$	219
6.37	Champs moyens de a.) vitesse axiale gazeuse, b.) vitesse axiale gazeuse fluctuante, c.) vitesse tangentielle gazeuse, et d.) vitesse axiale liquide dans le plan médian . .	221
6.38	Champs moyens de a.) fraction volumique liquide, b.) température liquide, c.) taux de dégagement de chaleur, d.) fraction massique de kérosène dans le plan médian	222

6.39	Champs instantanés de a.) indice de Takeno réactif (flamme de diffusion: noir, flamme de prémélange : blanc - la ligne noire représente l'isoligne $HR = 8.10^7 W.m^{-3}$), b.) fraction massique de kérosène, c.) fraction volumique liquide, et d.) fraction massique d'oxygène dans le plan médian	223
6.40	Distribution instantanée colorée par l'indice de Takeno réactif (flamme de diffusion : rouge, flamme de prémélange : bleu) de a.) température gazeuse et b.) fraction massique de kérosène gazeux en fonction de la fraction de mélange	224
41	Champs instantanés de particules colorés (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas ELD_{32}	267
42	Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux (d) dans le plan médian. Cas ELD_{32}	268
43	Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux (d) dans le plan médian. Cas $ELRR$	269
44	Champs instantanés de Takeno (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas $ELRR$	270

Liste des tableaux

4.1	Valeurs tabulées de la fonction ${}_2F_1$	102
4.2	Coefficients d'entraînement d'air : comparaison entre le modèle d'origine de San- josé (2009) et le présent travail	107
4.3	Caractéristiques de l'atomiseur de Yang et al. (2003)	109
4.4	Point de fonctionnement étudié	111
4.5	Paramètres du modèle FIM-UR pour la configuration de Yang et al. (2003)	111
4.6	Paramètres des maillages	111
4.7	Caractéristiques des différentes simulations	113
4.8	Cas EL_Poly. Pourcentage numérique et volumique des différentes classes	122
5.1	Les différents diamètres moyens et leur utilisation d'après Lefebvre (1989b)	142
5.2	Paramètres du maillage grossier pour les simulations THI	147
5.3	Paramètres du maillage fin pour les simulations THI	147
5.4	Comparaison des grandeurs caractéristiques de la phase gazeuse initiale et à $t_0 =$ $12.5 \cdot 10^{-5}$ s.	148
5.5	Caractéristique de la phase liquide pour le cas de référence	149
5.6	Valeurs des diamètres moyens (a) et par classe (b), et le nombre de Stokes associé .	153
5.7	Diamètres issus de la littérature des lits fluidisés et leur définition	165
5.8	Diamètres moyens D_{ij} et temps nécessaire à l'évaporation complète	165
5.9	Diamètres moyens $D^{\alpha\%}$, leur valeurs et le temps nécessaire à l'évaporation complète	167
6.1	Paramètres du point de fonctionnement	177
6.2	Paramètres des différentes simulations effectuées	179

6.3	Temps particuliers et temps d'évaporation pour les différentes simulations	180
6.4	Nombres de Stokes convectifs et de rotation dans les différentes simulations	180
6.5	Caractéristiques du maillage <i>mercEL</i>	182
6.6	Paramètres du modèle FIM-UR	182
6.7	Conditions aux limites	182
6.8	Comparaison du nombre de gouttes moyen, de la masse liquide moyenne et masse gazeuse moyenne de carburant pour les trois simulations	197
6.9	Caractéristiques du maillage <i>mercEE</i>	211
6.10	Conditions aux limites pour la phase liquide	213
6.11	Données d'entrée pour le modèle FIM-UR Eulérien modifié	213

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1	Contexte environnemental	28
1.1	<i>Formations des polluants</i>	28
2	Contexte industriel.	29
2.1	<i>Principe d'une turbine à gaz</i>	30
2.2	<i>Technologie des turbines à gaz aéronautiques.</i>	30
3	Combustion turbulente diphasique	36
3.1	<i>Couplage Spray/Turbulence</i>	38
3.2	<i>Couplage Combustion /Turbulence</i>	39
3.3	<i>Couplage Spray/Combustion : régime de combustion diphasique</i>	39

1 Contexte environnemental

Le transport aérien en plein essor depuis les trente dernières années (Lee et al. (2010)) contribue de façon non négligeable à l'augmentation des gaz à effet de serre dans l'atmosphère, induisant des modifications majeures et complexes sur l'évolution des biotopes terriens, et des niveaux marins à l'échelle mondiale. Les produits de combustion sont à l'origine de pathologies humaines inquiétantes. Longtemps négligé pour des raisons de volume d'émission très inférieur aux autres modes de transport, l'impact environnemental du trafic aérien fait maintenant l'objet d'une réglementation. Le consortium ACARE (pour Advisory Council for Aeronautics Research in Europe) a donc imposé une réduction de 50% des émissions de CO_2 et de 80% des émissions de NO_x pour 2020. Les industriels misent donc sur l'amélioration des technologies, afin de réduire la consommation de carburant et l'émission de polluants. Ces améliorations s'appuient sur un nombre considérable de domaines d'expertise, en passant par la science des matériaux, la thermique, les processus de combustion, ou encore l'utilisation des énergies renouvelables. Néanmoins, aujourd'hui encore, la combustion des produits raffinés du pétrole reste le moyen le plus efficace en termes de production d'énergie. L'amélioration des processus de combustion reste donc une voie de recherche privilégiée pour la réduction des polluants et l'amélioration des rendements.

1.1 Formations des polluants

La formation des polluants est à relier directement avec la consommation du carburant et la température des gaz de combustion. Du stockage dans les réservoirs jusqu'à la combustion, le carburant liquide est acheminé dans la chambre et subit une évaporation et une combustion dont les produits à leur tour subissent des réactions chimiques. Tous ces phénomènes interviennent en même temps. Les polluants générés par la combustion sont les suivants :

- le dioxyde de carbone, ou CO_2 est le produit principal de la combustion des hydrocarbures. Sa réduction n'est possible qu'en diminuant la consommation d'hydrocarbures.
- le monoxyde de carbone, ou CO , résulte de la combustion dans les zones où le dioxygène fait défaut, et donc de richesse élevée. Sa production principale est ainsi fortement liée à la qualité du mélange.
- Les oxydes d'azote, ou NO_x , sont les principaux polluants visés par la législation. Ils sont produits à haute température, par la recombinaison des radicaux hydrogénés du carburant avec les composants azotés de l'air. Un long temps de résidence des volumes chauds favorise la production de NO_x .
- Les imbrûlés, sont issus du carburant non totalement oxydé. Ils sont caractéristiques d'une mauvaise atomisation du carburant liquide ou d'un mauvais mélange.

- Les suies, sont produites dans les régions riches et résultent de l'agrégation des particules solides de molécules carbonées complexes (PAH) qui sont formées lors de la combustion. Leur cinétique chimique et leur structure dimensionnelle sont complexes et encore mal décrites. De plus, les suies ont un fort impact sur le rayonnement thermique.

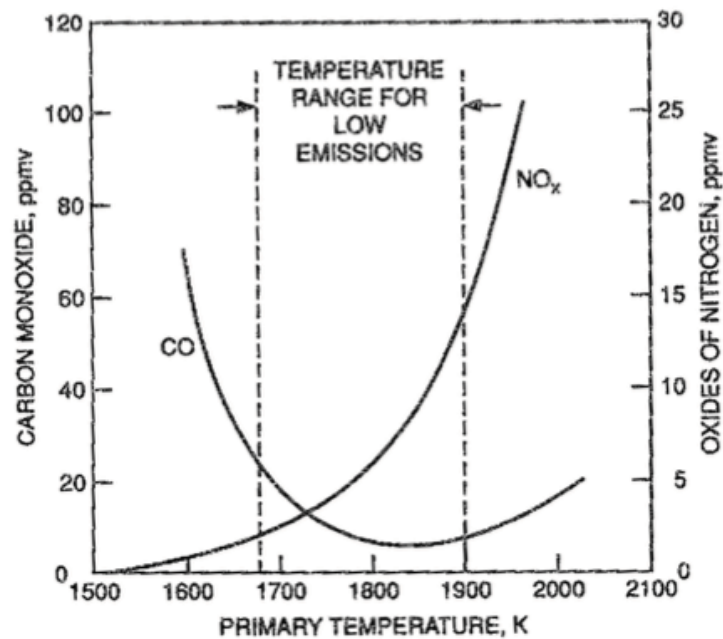


Figure 1.1: Production de polluants en fonction de la température des gaz brûlés (Lefebvre (1999))

La Figure 1.1 présente la dépendance de la production de CO et de NO_x en fonction de la température des gaz brûlés. Les températures inférieures à 1600K et supérieures à 2000K sont génératrices de polluants. Cependant, il existe un intervalle où les polluants sont en proportion plus faible : c'est la zone visée par les applications industrielles. Différents concepts de chambres de combustion ont été imaginés pour obtenir une température de gaz brûlés dans cette zone. On peut citer les approches RQL pour Rich burn- Quick quench - Lean burn, LPP pour Lean Premixed Prevaporized, ou encore LDI pour Lean Direct Injection, où la dilution joue un grand rôle. Ces approches sont résumées en section 2.2. 3).

2 Contexte industriel

La propulsion aéronautique est essentiellement basée sur le concept de turbine à gaz, dont on rappelle brièvement les principes dans cette section.

2.1 Principe d'une turbine à gaz

Le concept initial est décrit en Fig 1.2, qui représente un cycle de Brayton, ou cycle de Joule. Une compression isentropique à travers un compresseur transmet du travail mécanique au fluide, qui passe ensuite dans la chambre de combustion, où il s'enrichit encore en énergie grâce aux réactions chimiques qui s'y produisent. Le fluide ainsi amené à température et pression élevées transmet son énergie à la turbine qui produit finalement la poussée.

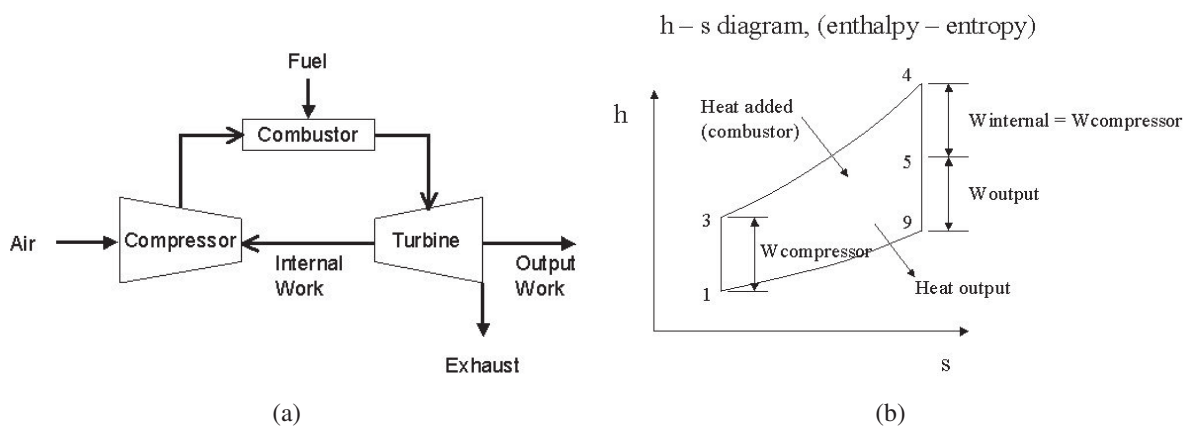


Figure 1.2: Schéma du cycle de Brayton (a) et représentation dans un diagramme h-s (b)

2.2 Technologie des turbines à gaz aéronautiques

Un moteur aéronautique est donc composé de trois blocs, un compresseur, une chambre de combustion et une turbine (Fig 1.3 (a)). Concernant la chambre de combustion, on retrouve les composants habituels : un système d'injection d'air qui génère un écoulement gazeux turbulent, un système d'injection de carburant liquide, un système d'allumage, et des systèmes annexes de refroidissement (Fig 1.3 (b)).

L'écoulement gazeux apporte l'oxydant nécessaire à la combustion et est également utilisé pour le refroidissement. Dans la chambre de combustion, il installe une structure tourbillonnaire permettant à la flamme de se stabiliser en zone proche de l'injecteur. Il interagit aussi avec la phase liquide, pour générer le fin nuage de gouttelettes évaporantes qui va remplir la chambre et alimenter la flamme. Le dispositif d'allumage, généralement placé sur la paroi de la chambre en zone primaire, permet la création d'un noyau de flamme qui va se développer en flamme turbulente pour finir par stabiliser la flamme en proche injecteur.

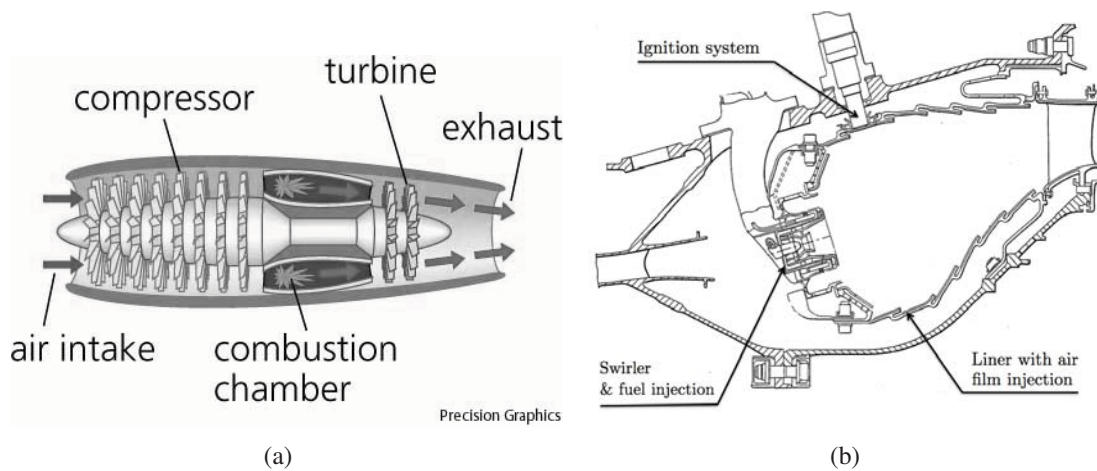


Figure 1.3: Schéma d'une turbine à gaz (a) et d'une chambre de combustion (b)

2.2. 1) Écoulement aérodiphasique

L'injection du liquide est un phénomène critique puisqu'il a un fort impact sur l'ensemble des processus de combustion. Le rôle d'un injecteur est de transformer le liquide en un nuage de gouttes propice à la combustion, c'est-à-dire le plus fin possible, afin de favoriser l'évaporation et le mélange en phase gazeuse qui doit permettre la stabilisation d'une flamme. Pour éviter que la flamme ne soit soufflée, celle-ci doit être capturée dans une zone de recirculation, où la vitesse axiale est négative, c'est-à-dire dans la direction remontante vers l'injecteur, afin de maintenir la flamme près de l'injecteur. Pour créer une zone de recirculation, différents procédés existent, notamment l'usage d'obstacles (bluff bodies), c'est-à-dire des obstacles matériels, qui doivent résister à des températures très élevées. Une autre solution est donc préférée, et consiste à mettre l'écoulement en rotation grâce à des tourbillonneurs (swirlers), éléments géométriques composés de différents canaux appelés veines, orientés axialement ou radialement, de manière à donner à l'écoulement un mouvement de rotation. Une dépression se forme alors au centre du jet d'air, et une zone de recirculation apparaît. Cette zone est soumise à une instabilité hydrodynamique caractéristique : le PVC (pour Precessing Vortex Core) (Fig 1.4). Ce dernier est une structure axisymétrique tridimensionnelle instationnaire qui tourne autour de l'axe principal de l'écoulement à une fréquence bien définie. Ce PVC affecte fortement l'écoulement et la flamme, et interagit avec la phase liquide (Syred (2006)). Deux types de swirler existent : les swirlers radiaux ou axiaux, que l'on peut combiner, dans un sens co-rotatif ou contra-rotatif, afin d'augmenter le cisaillement et donc le mélange turbulent dans l'écoulement (Fig 1.5).

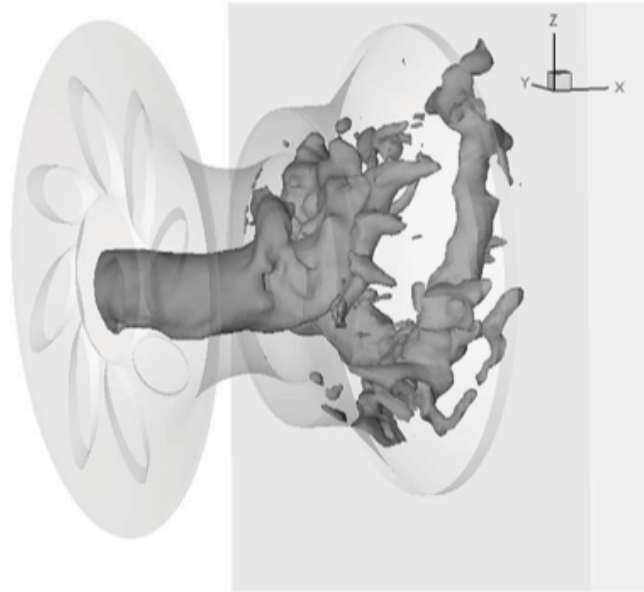


Figure 1.4: Visualisation du PVC, par isosurface de pression à 99500 Pa (Wang et al. (2007))

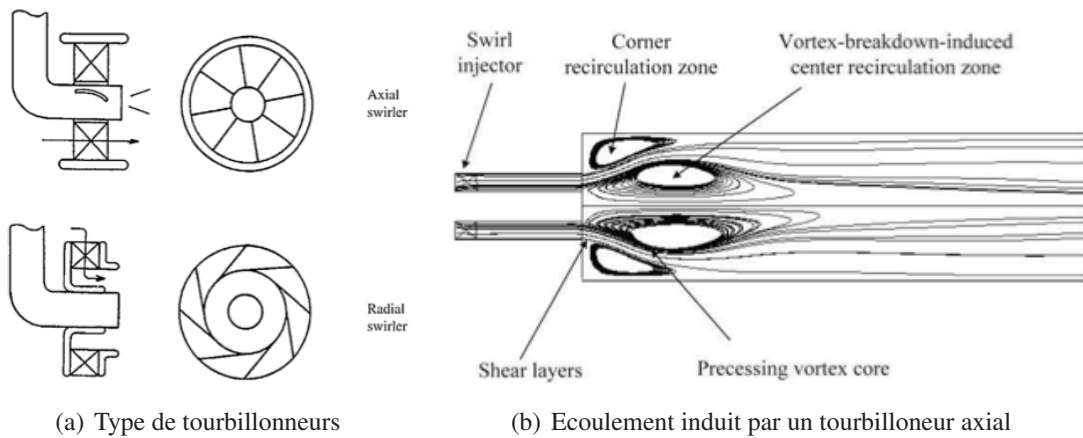


Figure 1.5: Schéma des différents types de tourbillonneurs et écoulement induit (Winterfeld et al. (1990))

2.2. 2) Injection liquide

Pour des raisons d'encombrement spatial, le carburant est stocké sous forme liquide, et fragmenté via des injecteurs en fines gouttelettes afin d'augmenter sa surface et son interaction avec le gaz. La physique liée au processus d'atomisation est extrêmement complexe et nécessite des niveaux de raffinement et des outils avancés (Lebas et al. (2009), Fuster et al. (2009)) qui restent prohibitifs

dans les simulations appliquées à des cas industriels.

Dans les canaux d'acheminement et jusqu'à la sortie d'injecteur, le liquide subit de forts effets de turbulence confinée, dépendants principalement de la géométrie. A sa sortie d'injecteur, le jet liquide subit des perturbations liées aux phénomènes d'instabilités d'interface, plus ou moins intenses en fonction du cisaillement gaz-liquide. La zone qui suit est une zone où le jet liquide disparaît pour former des particules discrètes, non-sphériques, appelées ligaments. Finalement dans la zone suivante, le liquide est en phase dispersée, uniquement composée de gouttes supposées sphériques et susceptibles de s'évaporer.

De nombreuses technologies d'injecteurs existent. On présente ici en Fig 1.6 les deux principales techniques utilisées dans les chambres aéronautiques.

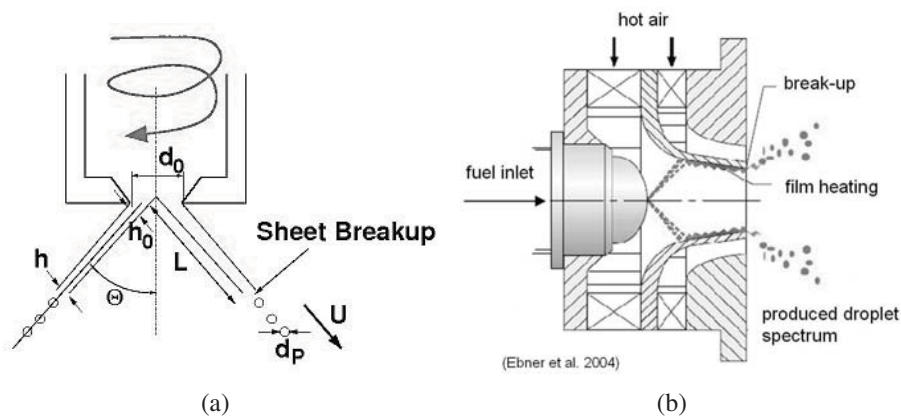


Figure 1.6: Schéma d'un injecteur simplex (a) et d'un injecteur air blast (b)

Les injecteurs simplex (aussi appelés "pressure swirl atomizer") sont pressurisés (Fig 1.6 (a)). La taille des gouttes dépend du point de fonctionnement, et des paramètres géométriques de l'injecteur lui-même. La forme du spray est en général un cône (plein ou creux). Les atomiseurs à air assisté, "air blast" sont illustrés en Fig 1.6 (b). Dans ce type d'injecteur, le jet liquide impacte la paroi du diffuseur et forme un film que l'air vient désintégrer pour former des gouttes en bout de lèvre. L'air doit être injecté suffisamment vite pour interagir avec le film et assurer une bonne atomisation. Les gouttes issues de l'atomisation primaire peuvent mener à différents régimes d'impact (Moreira et al. (2010); Castanet et al. (2009)).

Tous ces injecteurs sont caractérisés par leur distribution de vitesse et de taille de goutte en sortie d'injecteur. Les granulométries les plus rencontrées sont les distributions de Rosin Rammler, log-normale ou encore log-log normale. Les deux premières distributions ont un comportement très proche (Fig. 1.7 (a)). Elles possèdent un seul pic et caractérisent bien les injecteurs simplex. La distribution log log normale caractérise la présence d'un premier pic de taille de gouttes puis d'un second pic ou d'une zone plus homogène (Fig. 1.7 (b)).

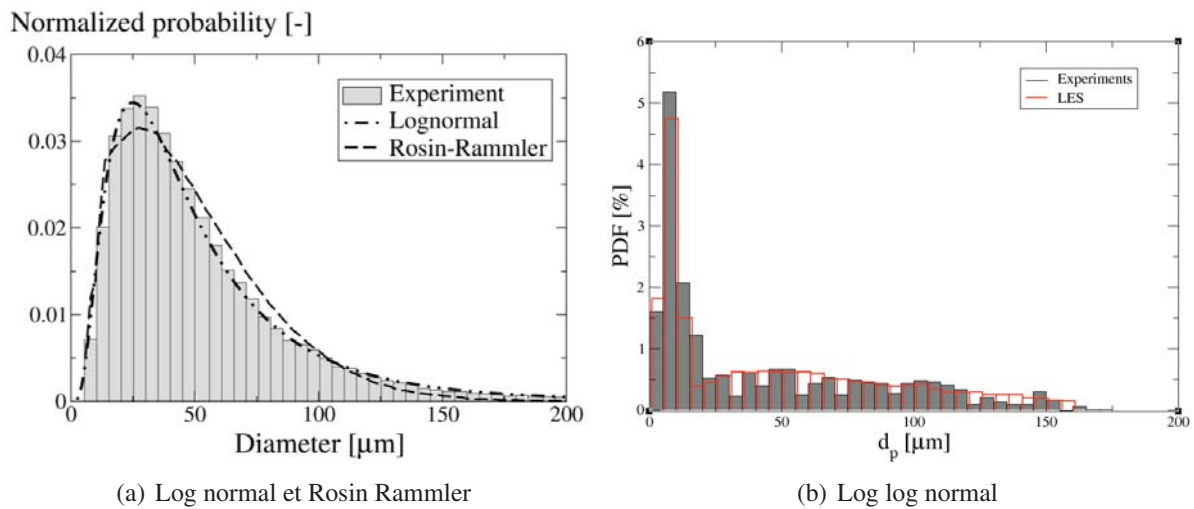


Figure 1.7: Comparaison des distributions en taille de gouttes : (a) log normale, Rosin Rammler et expérience pour un injecteur simplex (Senoner (2010)) ; (b) log log normal et expérience pour un injecteur bi-modal (deux pics) (Zhu (2010))

2.2. 3) Concepts de chambre de combustion

Un certain nombre de concepts de chambre a vu le jour pour réduire les émissions polluantes tout en conservant les performances en termes de puissance (Tacina (1990)). Les principaux concepts sont présentés ci-dessous :

Le RQL (pour Rich Burn, Quick quench, Lean burn) (Novick and Troth (1981))

Le but ici est de réduire la présence et surtout la persistance de points chauds dans la chambre. On brûle d'abord à richesse élevée dans la première partie du tube à flamme, puis on dilue le mélange par des gaz frais, ce qui permet de réduire la formation des NO_x . Plus en aval, une deuxième combustion a lieu, mais en régime bien plus pauvre. On évite ainsi la zone de richesse autour de la stoechiométrie où la production de NO_x est maximale (Fig 1.8). Dans ce système, 70% de l'air injecté est dédié au mélange, à la dilution, et au refroidissement.

Le LPP (pour Lean Premixed Prevaporized)

Dans ce type de configuration, l'air et le carburant sont mélangés, et pré-évaporés si le carburant est liquide, en amont de la chambre de combustion, ce qui augmente la qualité de la combustion. Celle-ci a lieu en excès d'air afin de réduire la température de la flamme ce qui tend à réduire la production de NO_X thermique. Le concept LPP est attractif et est considéré comme une technologie prometteuse, mais il est souvent soumis à de nombreuses instabilités (Lieuwen et al. (2001));

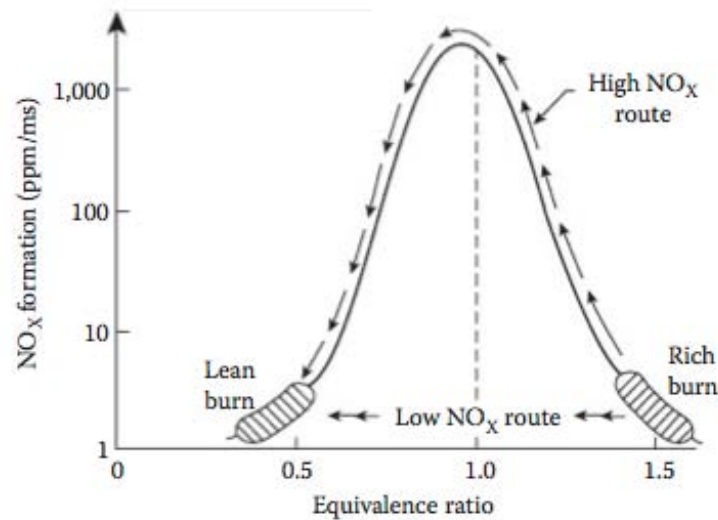


Figure 1.8: Schéma présentant l'intérêt de la méthode RQL, extrait de [Lefebvre \(2010\)](#)

[Lieuwen and Yang \(2005\)](#)). Celles-ci peuvent atteindre des amplitudes suffisamment importantes pour interférer avec l'acoustique du moteur, et provoquer des altérations plus ou moins sérieuses de la structure, par vibration ou encore par destruction thermique des parois exposées à la flamme qui peut remonter l'écoulement (flashback). De plus, le point de fonctionnement des LPP reste très proche de la limite d'extinction pauvre, et une variation de la richesse peut induire une extinction ([Lieuwen and McManus \(2003\)](#)).

La LDI (pour Lean Direct Injection)

Proche du concept de LPP, la LDI permet elle aussi une combustion pauvre. Ici le carburant est directement injecté dans la chambre, où la combustion est globalement pauvre. Les injecteurs sont composés de swirlers, souvent plus de deux, afin d'augmenter le cisaillement, et la qualité du mélange, comme dans le LM6000 de General Electric ([Grinstein and Fureby \(2005\)](#)) qui dispose de deux swirlers contrarotatifs (Fig 1.9). Ce type de technologie tend à employer plusieurs injections de carburant qui s'activent en fonction du point de fonctionnement.

2.2. 4) L'allumage

Initier la combustion reste un phénomène critique, difficile à maîtriser car il est transitoire et a lieu dans des conditions souvent peu favorables. Trois types de système d'allumage sont à retenir :

- Les bougies, composées de deux électrodes interne et externe, alimentées par un circuit électrique, engendrent une ionisation locale de l'air au moment de la décharge. Cette ionisation forme un arc électrique qui peut initier un noyau de flamme. L'estimation de l'énergie trans-

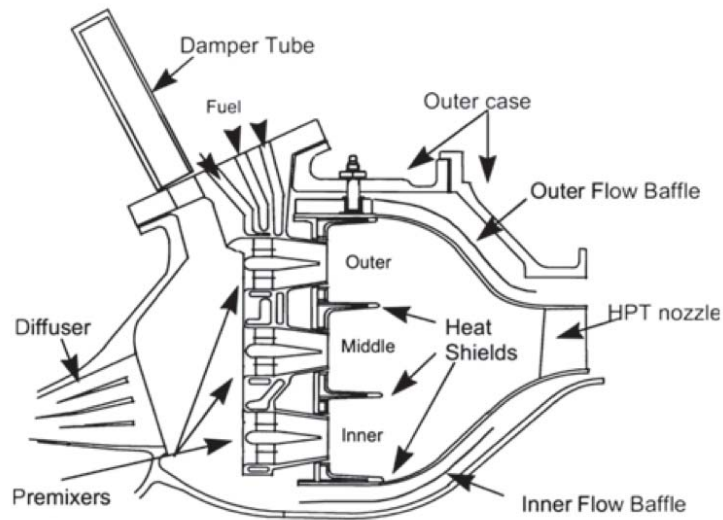


Figure 1.9: Schéma présentant le LM6000 de General Electric, extrait de [Joshi et al. \(1994\)](#)

mise au gaz est difficile du fait de pertes thermiques dues au rayonnement, à la conduction dans les électrodes, et au système électrique. Un inconvénient est que les bougies sont nécessairement positionnées en proche paroi, c'est-à-dire dans une zone *a priori* moins favorable à l'allumage.

- Les lasers produisent eux aussi un noyau de flamme. Des observations ont montré des phénomènes d'absorption dans l'écoulement, ce qui diminue la quantité d'énergie déposée si la distance zone de dépôt - zone d'émission est grande. Cependant, le dépôt peut être effectué n'importe où dans la chambre. De plus, des phénomènes d'ionisation ont été reportés, ce qui peut améliorer l'allumage en facilitant localement la création de radicaux réactifs.
- Les torches sont des flammes qui produisent des gaz chauds. Les gaz brûlés ainsi créés vont allumer les injecteurs voisins. Néanmoins, la torche elle-même est allumée par une bougie.

3 Combustion turbulente diphasique

La complexité des concepts liés à la combustion, à la turbulence, et aux interactions entre phase gazeuse et phase liquide est grande. Dans les applications aéronautiques, ces trois physiques sont présentes en même temps, et sont couplées par un ensemble de phénomènes eux aussi très complexes comme le montre la Fig 1.10. La combustion est contrôlée par la qualité du mélange, c'est-à-dire l'interaction entre la turbulence et le spray évaporant. Ce dernier est initialement injecté et atomisé pour produire le nuage de gouttes qui va brûler. D'autres phénomènes sont également

présents, tels que l'acoustique ou la thermique mais ne sont pas représentés ici car ne font pas l'objet de la présente étude.

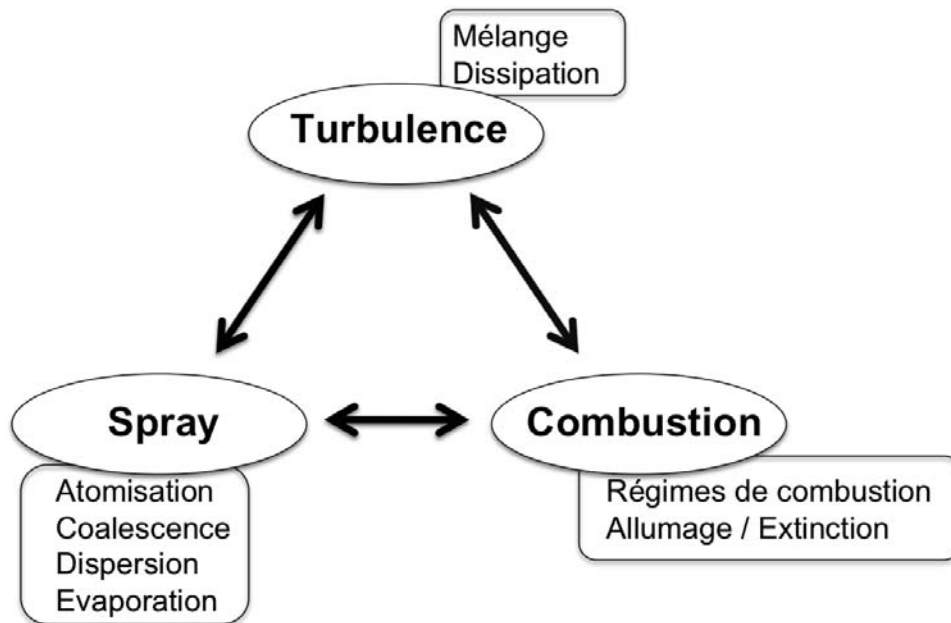


Figure 1.10: Représentation du couplage entre la combustion, la turbulence et le spray

La combustion turbulente diphasique est difficile à observer, du fait de la présence des gouttes et des températures élevées, et la simulation est ici très utile. Pour les écoulements turbulents, différentes classes d'approches existent :

- On parle de Simulation Numérique Directe (SND ou DNS pour Direct Numerical Simulation) quand l'écoulement est résolu dans son intégralité, mais son coût CPU la rend peu adaptée à des fins industrielles, et elle reste principalement appliquée à des cas académiques et pour des échelles spatiales réduites (Givi (1989); Poinso et al. (1996); Vervisch and Poinso (1998)), dans un but de compréhension des phénomènes fondamentaux. Néanmoins, le développement et l'augmentation de la puissance des supercalculateurs a récemment permis d'utiliser cette méthode dans des géométries complexes (Moureau et al. (2010); Luo et al. (2011)).
- A l'opposé, la méthode RANS (pour Reynolds-Averaged Navier-Stokes) est très intéressante pour les applications industrielles. En effet, pour un coût CPU très faible, elle calcule une moyenne d'ensemble, où toute la turbulence est modélisée (Brewster et al. (1999))
- A mi-chemin entre ces deux méthodes, la SGE (pour Simulation aux Grandes Échelles, ou LES pour Large Eddy Simulation) résout les grandes structures turbulentes, porteuses

d'énergie, et utilise des modèles de sous-maille pour décrire l'effet des petites échelles (Moin (2002)).

Ces trois approches décrivent les écoulements turbulents de façon très différente, comme l'illustre la Fig 1.11.

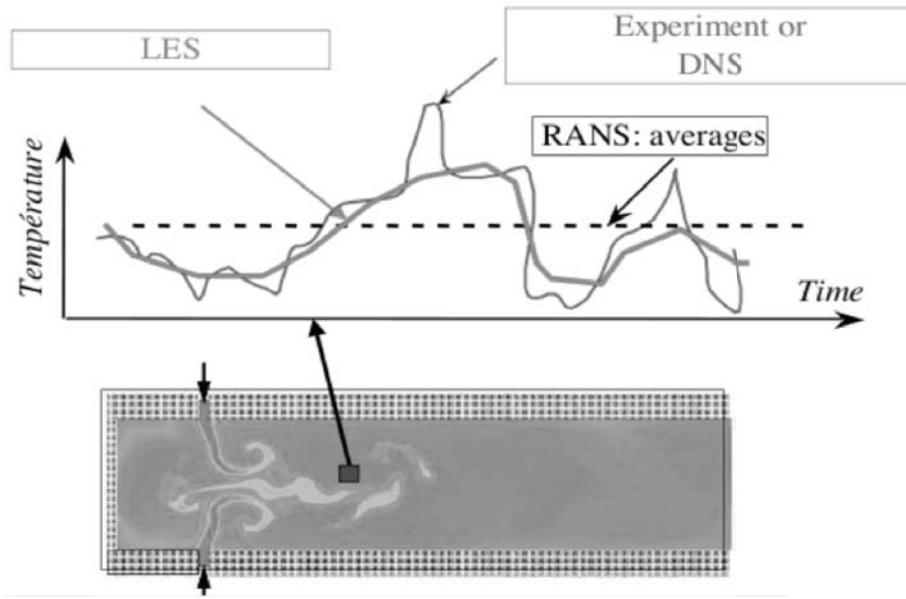


Figure 1.11: Comparaison entre les différentes méthodes numériques dans un statoréacteur (Roux (2009))

3.1 Couplage Spray/Turbulence

On considère ici la phase liquide sous la forme diluée, c'est-à-dire que les gouttes sont suffisamment peu nombreuses pour que les interactions entre particules soient négligeables. L'interaction spray-turbulence a été largement étudiée dans la littérature. De nombreux auteurs (Mizutani et al. (1990); Albrecht et al. (1999); Réveillon et al. (1998); Sommerfeld and Qiu (1998); Karpetis and Gomez (2000); Vié et al. (2009), Squires and Eaton (1991b)) ont mis en évidence le phénomène de concentration préférentielle, c'est-à-dire l'augmentation du nombre de particules dans les zones de faible vorticit . Ce ph nom ne est caract ris  par le nombre de Stokes St , rapport d'un temps particulaire et d'un temps fluide :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (1.1)$$

Pour les grands nombres de Stokes, les gouttes ont un comportement balistique et subissent très peu l'influence du gaz. Pour des nombres de Stokes inférieurs à 1, les gouttes se mettent très vite à l'équilibre avec le gaz et se comportent en traceurs. Pour un nombre de Stokes voisin de l'unité, les gouttes interagissent avec le fluide porteur avec une certaine inertie et peuvent conduire au phénomène de concentration préférentielle. Mashayek et al. (1997) et Réveillon and Demoulin (2007) ont montré que cette concentration préférentielle jouait un grand rôle dans le processus d'évaporation, en modifiant localement les conditions de température et de pression partielle de vapeur de carburant.

3.2 Couplage Combustion /Turbulence

Pour caractériser l'interaction flamme-turbulence, on utilise des nombres sans dimension qui permettent de construire des diagrammes de régimes de combustion turbulente (Burke and Schumann (1928)). Le nombre de Damköhler compare un temps caractéristique turbulent τ_f à un temps chimique τ_c . Le nombre de Karlovitz, est similaire au nombre de Damköhler mais le temps fluide correspond au temps de Kolmogorov τ_k , associé aux plus petites échelles de l'écoulement (échelles de Kolmogorov) (Borghi (1985); Williams (1985); Peters (2001); Poinsot and Veynante (2011)).

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_c} \text{ et } Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} \quad (1.2)$$

Lorsque le nombre de Damköhler est grand, le temps chimique est bien inférieur au temps turbulent : la zone réactive est donc fine et convectée par l'écoulement. La structure interne de la flamme est peu affectée par la turbulence, et peut être considérée similaire à la structure d'une flamme laminaire : on parle de flammelette. A l'inverse, pour des nombres de Damköhler faibles, on a une chimie très lente, les réactifs et produits sont mélangés par la turbulence beaucoup plus rapidement qu'ils ne réagissent et on obtient une combustion en volume. Dans les systèmes pratiques qui nous intéressent, les nombres de Damköhler sont dans une gamme moyenne à élevée. Une classification similaire peut être faite à partir du nombre de Karlovitz. Pour un nombre de Karlovitz faible, on est en régime de flammelette : il y a peu d'interaction entre la turbulence et la structure de flamme, même au niveau des plus petites structures. Pour des Ka moyens, la flamme est plus sujette à la turbulence, mais reste mince. Pour des Ka grands, la turbulence a un fort impact sur la structure de flamme. Pour la combustion non prémélangée, la prise en compte de paramètres supplémentaires est nécessaire. Le mélange turbulent prend un rôle prépondérant, et une distance caractéristique de mélange doit être introduite. Les différents régimes sont illustrés en Fig 1.12.

3.3 Couplage Spray/Combustion : régime de combustion diphasique

Le couplage combustion/spray est régi par le rapport du temps d'évaporation et de convection des gouttes. Si ce rapport est faible, les gouttes s'évaporent avant d'atteindre la flamme et on a

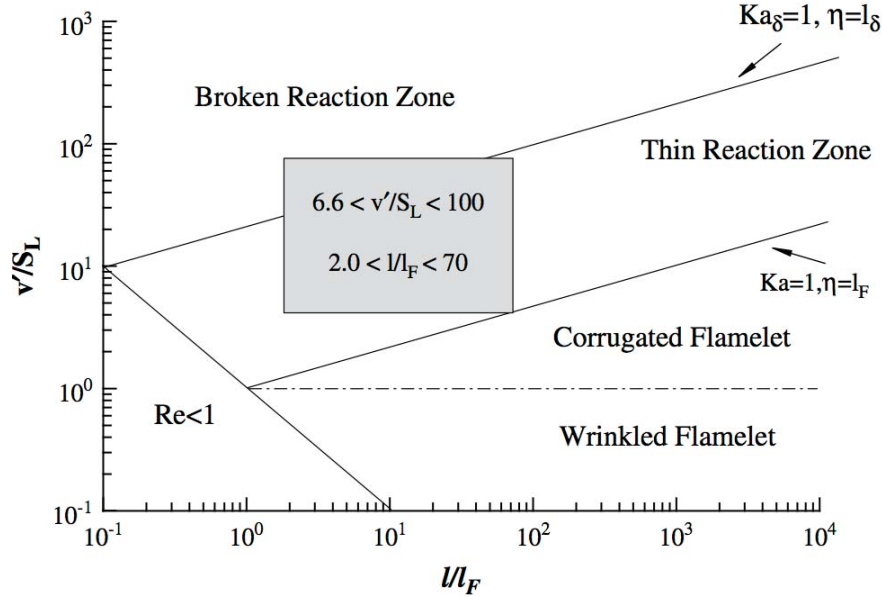


Figure 1.12: Diagramme des régimes de combustion prémélangée extrait de [Huang and Yang \(2009\)](#), v' représente la vitesse de l'écoulement, S_L la vitesse laminaire de flamme

une combustion purement gazeuse. Au contraire, si ce nombre est grand, une interaction subtile a lieu entre les gouttes évaporantes, générant du carburant gazeux, et la flamme. De plus, le spray génère un champ non homogène de vapeur de carburant qui contrôle la flamme. Un des paramètres importants en combustion est la vitesse de flamme, qui est fortement impactée par la présence des gouttes. Les simulations de propagation de flammes laminaires monodimensionnelles de [Neophytou and Mastorakos \(2009\)](#) montrent que la vitesse de flamme est maximale quand la richesse totale vue par la flamme est près de l'unité : un premier spray pauvre crée une première flamme, suivie d'une longue zone de combustion diphasique. Les spray les plus riches génèrent une première flamme très courte, et les gouttes restantes se pyrolysent dans les gaz brûlés, où les produits rétrodiffusent vers la flamme et augmentent le taux de réaction. Des mesures de vitesse de flamme ([Umemura \(2011\)](#)) ont été effectuées dans des configurations expérimentales, mais les effets d'expansion volumique par la turbulence ne permettent pas de bien caractériser cette vitesse. [Umemura and Takamori \(2005\)](#) propose une classification de la propagation de la flamme dans un spray, et s'appuie là encore sur la distance entre gouttes pour séparer les modes de combustion, notamment la combustion d'une goutte isolée ([Kuo \(2005 Second Edition\)](#)). [Beck et al. \(2009b,a\)](#) s'intéresse à la simulation numérique directe d'une goutte isolée qui brûle, afin de déterminer les mécanismes liés à la production de NO_X : les régimes de combustion diphasique en diffusion, comme la combustion en groupe, sont alors plus susceptibles de créer des points chauds, et donc des NO_X .

Nakamura et al. (2005) effectuent la simulation numérique directe d'une flamme diphasique à contre courant, et observe trois structures distinctes, une première flamme de prémélange, une combustion de groupe des grosses gouttes dans les gaz brûlés après la première flamme et une flamme de diffusion accrochée au point de stagnation. L'étude d'un spray réactif dans un milieu turbulent a aussi été réalisée par Domingo et al. (2005); Réveillon and Vervisch (2004), et confirme la structure de flamme complexe, mélangeant des régimes de combustion prémélangée et des régimes de combustion non prémélangée.

Une classification des flammes diphasiques a été proposée par Chiu et al. (1982) puis Borghi (1996) et enfin par Réveillon and Vervisch (2005). Un nombre de combustion de groupe G y est introduit, prenant en compte le nombre de gouttes et la distance inter-gouttes δ_s . Si ce nombre de groupe est grand ($G \gg 1$), les gouttes sont suffisamment éloignées et chaque goutte s'évapore et brûle indépendamment des autres (Kuo (2005 Second Edition)). Dans le cas contraire ($G \ll 1$), elles forment un groupe de gouttes qui brûlent ensemble, on parle de combustion en enveloppe externe. Pour les valeurs intermédiaires, les deux régimes coexistent comme l'illustre la Fig 1.13.

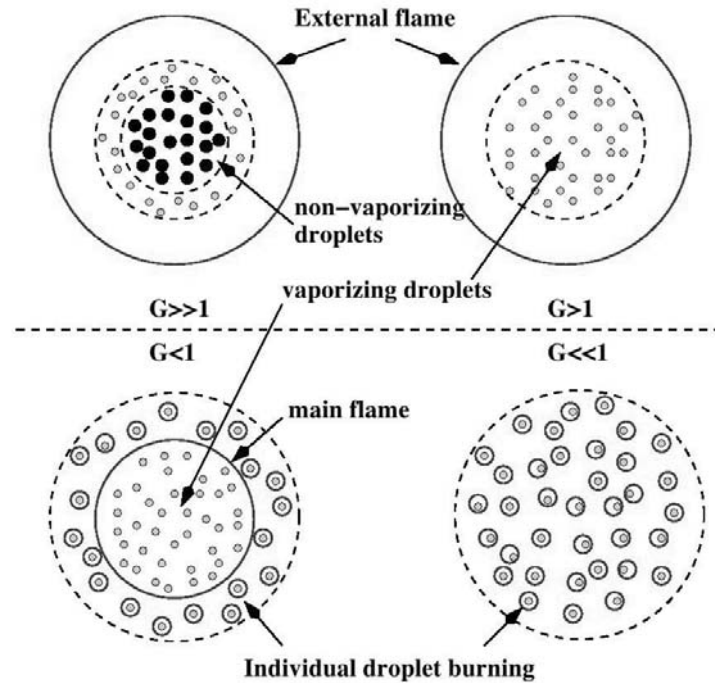


Figure 1.13: Régimes de combustion diphasique, d'après la classification de Chiu et al. (1982)

Les travaux de Borghi (1996) introduisent des paramètres supplémentaires pour cette classification, le temps d'évaporation τ_{evap} , le temps caractéristique de la flamme τ_f et son épaisseur δ_f . Si $\tau_{evap} \ll \tau_f$, les gouttes sont évaporées en amont du front de flamme et on a une flamme gazeuse. Néanmoins, différentes valeurs de fraction massique de carburant gazeux peuvent induire un prémélange partiel. Si $\tau_{evap} \gg \tau_f$, la combustion est plus complexe. Dans le cas où $\delta_f > \delta_s$,

les gouttes traversent le front de flamme et viennent l'épaissir. A l'inverse, si $\delta_f < \delta_s$, les gouttes qui traversent le front de flamme, brûlent dans une seconde zone réactive.

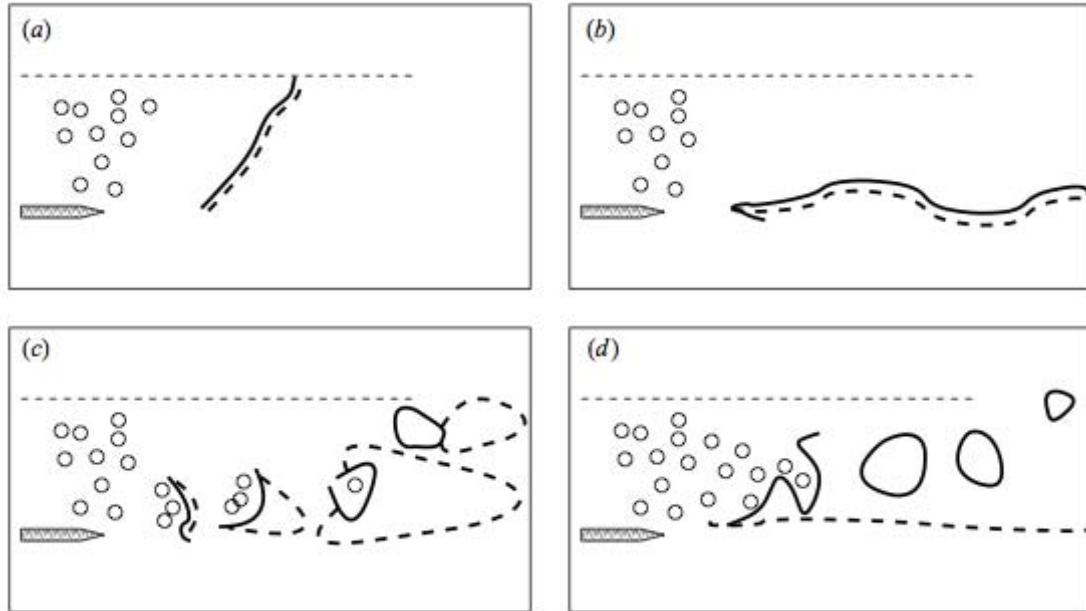


Figure 1.14: Représentation des régimes de combustion diphasique par Réveillon and Vervisch (2005) : trait plein pour combustion prémélangée, trait discontinu pour combustion non prémélangée

Les travaux de Réveillon and Vervisch (2005) mettent par ailleurs l'accent sur d'autres phénomènes qui sont la variation de richesse d'une part et les effets de la turbulence d'autre part, en effectuant des simulations numériques 2D de flammes de spray faiblement turbulentes dans un écoulement d'air co-courant, variant la richesse de spray à l'injection.

- Pour des richesses très faibles (régime de combustion externe fermée, Fig 1.14 (a)) , le front est principalement prémélangé, et l'intégralité du carburant est consommée.
- Pour des richesses très importantes, (régime de combustion externe ouverte en Fig 1.14 (b)), le carburant brûle en diffusion et en prémélange.
- Pour des richesses intermédiaires, (combustion de groupe en Fig 1.14 (c)), les gouttes forment des poches dont la combustion a lieu en prémélange puis en diffusion. Si la richesse de la combustion en prémélange est trop grande, on parle de combustion hybride (Fig 1.14 (d)), et des poches de carburant gazeux brûlent en diffusion dans le co-courant d'air.

Des structures de flamme diphasique sont aussi observables dans des simulations aux grandes échelles de flammes diphasiques dans des chambres aéronautiques, où un solveur Lagrangien est

utilisé pour simuler la phase liquide. Un bon accord avec l'expérience est obtenu quant à la structure de flamme (Itoh et al. (2003); Jones et al. (2010); Marchione and ad E. Mastorakos (2009); Jones et al. (2011a,b, 2012)). Des simulations numériques directes tridimensionnelles de flammes de n-heptane diphasiques, dans un brûleur avec swirl (Luo et al. (2011)) présentent une structure de flamme mélangeant flamme de prémélange, et poches de gouttes et kérosène gazeux qui brûlent en diffusion. La flamme prémélangée contribue alors à plus de 70% du dégagement de chaleur total, alors que les régions brûlant en prémélange occupent un volume plus petit que les flammes de diffusion. L'approche couplée Level-Set/Ghost Fluid en simulation numérique directe est utilisée pour l'évolution d'un spray réactif (Zoby et al. (2011)) et la comparaison de différents modèles d'évaporation. Elle remarque que le modèle du "un tiers deux tiers" sous estime le taux d'évaporation d'un facteur deux, pour des températures importantes.

Toutes ces études ont apporté des éléments pour la compréhension des flammes diphasiques, mais la diversité et la complexité de la structure de ces flammes laissent encore ouvertes de nombreuses questions. On peut en citer quelques-unes:

- Comment et dans quelle mesure la distribution de taille de gouttes influe-t-elle sur l'évaporation et la combustion ?
- Dans quelles mesures un spray polydisperse induit une structure de flamme différente d'un spray monodisperse?
- Quelles sont les différentes structures de flammes diphasiques possibles dans les écoulements complexes?
- Un outil LES est-il capable de simuler la structure complexe d'une flamme diphasique ?

L'objectif de cette thèse est de contribuer à répondre à ces questions, par une série de simulations réactives diphasiques principalement en formulation Lagrangienne, dans des configurations de complexité croissante, allant de la simple injection en milieu ouvert à un écoulement académique de type Turbulence Homogène Isotrope, pour étudier finalement la flamme diphasique obtenue dans un brûleur de type aéronautique.

Objectifs de cette thèse et organisation du manuscrit

Dans le cadre de cette étude, on utilise principalement la formulation Lagrangienne pour la phase dispersée. Un calcul en formulation Eulérienne est également réalisé pour la configuration du brûleur aéronautique à des fins de comparaison. Le solveur pour la formulation Eulérienne utilisé dans cette thèse est le plus ancien et est le fruit des travaux de Kaufmann (2004), suivis de ceux de Mossa (2005) et Riber (2007), étendus en géométrie complexe, par Lamarque (2007); Boileau (2007); Sanjosé (2009); Jaegle (2009). L'implantation du solveur Lagrangien a été réalisée plus tard par García et al. (2007), puis testée par Senoner (2010) et Jaegle (2009).

L'objectif de cette thèse est de contribuer à répondre aux questions qui se posent encore sur la structure des flammes diphasiques, en utilisant les modèles et méthodes les plus précis possibles. Ainsi, une première phase du travail s'attache à améliorer les modèles nécessaires :

- Injection : le travail sur l'injection initié par [Martinez et al. \(2010\)](#) puis [Sanjosé \(2009\)](#) a conduit à un premier modèle validé dans le cas d'une chambre aéronautique simplifiée. Des améliorations y sont apportées.
- Evaporation : les travaux de [Sierra \(2012\)](#) mettaient en évidence une faiblesse dans le modèle d'évaporation. Son nouveau modèle est présenté et utilisé.
- Distribution de taille de gouttes : la formulation Lagrangienne permet d'évaluer l'importance pour la dispersion des gouttes et leur évaporation, du caractère polydisperse d'un spray par rapport à une approche monodisperse, souvent utilisée dans le cadre de la formulation Eulérienne.

Ces développements permettent ensuite d'étudier la structure de flamme diphasique dans un brûleur aéronautique simplifié. Une application à un brûleur industriel est finalement présentée en annexe 6. Le manuscrit est donc décomposé en 2 parties.

- La première partie présente les méthodes et modèles utilisés et développés dans cette thèse.
 1. Equations pour la phase gazeuse dans l'approche LES.
 2. Equations pour la phase dispersée pour les deux formalismes Eulérien et Lagrangien, et modèles pour les termes d'échanges entre phases.
 3. Modèle FIM-UR pour l'injection liquide dans un cas simple laminaire pour les deux formalismes, et contribution de la polydispersion.
 4. Etude a priori de l'effet de la polydispersion et implication pour le choix du diamètre moyen dans les cas monodisperses.
- La deuxième partie présente les simulations et l'analyse de la flamme diphasique dans la configuration MERCATO.
 1. Impact de la polydispersion sur la structure de flamme.
 2. Premiers résultats obtenus avec le formalisme Eulérien.

Partie I

Modèles et équations pour les écoulements diphasiques réactifs

Chapitre 2

Description et modèles pour la phase gazeuse

On définit dans ce chapitre les équations et modèles théoriques utilisés dans la suite de ce mémoire pour décrire la phase gazeuse dans les écoulements turbulents réactifs. Dans un premier temps, les équations de conservation, ainsi que la thermodynamique des gaz sont explicitées. Puis on détaille brièvement les caractéristiques de la turbulence, afin de présenter la Simulation aux Grandes Échelles (LES). La dernière partie introduit la combustion et présente les méthodes de résolution des flammes turbulentes. On présente brièvement le code AVBP.

Sommaire

1	Équations de conservation et loi d'état	48
2	Thermodynamique des gaz	49
2.1	Équation d'état des gaz parfaits	49
2.2	Phénomènes diffusifs	49
3	La Turbulence	51
3.1	D'où vient la turbulence?	51
3.2	Un phénomène multi-échelles	52
3.3	Approche numérique de la Turbulence	52
4	Combustion	55
4.1	Généralités sur les régimes de combustion	55
4.2	Chimie	57
4.3	Modélisation de la combustion turbulente	60

1 Équations de conservation et loi d'état

Les équations présentées ici sont les équations de conservation de la quantité de mouvement, de l'enthalpie, et des espèces chimiques, qui constitue le système d'équations décrivant un écoulement réactif.

Conservation de la masse

L'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

où u est le vecteur vitesse, ρ la masse volumique.

Conservation des espèces

Pour un écoulement multi-espèces réactif composé de N espèces, on écrit une équation de conservation pour chaque espèce :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{i,k}) Y_k) = \dot{\omega}_k + S_1^k \text{ pour } k \in [1; N] \quad (2.2)$$

où S_1^k est le terme source lié à l'évaporation, qui sera défini dans la partie suivante, et $\dot{\omega}_k$ est le terme source lié à la combustion.

Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + S_1 \quad (2.3)$$

où τ le tenseur des contraintes visqueuses, p la pression, et S_1 le terme d'échange avec la phase dispersée, défini dans le chapitre suivant.

τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \quad (2.4)$$

$$\text{avec : } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.5)$$

où S_{ij} est le tenseur des vitesses de déformation.

Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i e) = \dot{\omega}_T - \frac{\partial}{\partial x_j}[u_i(p\delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j] + S_1^T \quad (2.6)$$

où S_1^T est le terme source lié aux échanges de température avec la phase liquide, qui sera défini dans la partie suivante, $\dot{\omega}_T$ est l'énergie dégagée par la réaction et q est le flux de chaleur.

2 Thermodynamique des gaz

2.1 Équation d'état des gaz parfaits

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$p = \rho \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} T \quad (2.7)$$

$$\text{avec : } \frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.8)$$

où \bar{W} est la masse molaire du mélange et $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J.mol}^{-1}.K^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits.

2.2 Phénomènes diffusifs

2.2. 1) Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'éq. 2.9 soit satisfaite. $V_{i,k}$ représente la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k = 1, \dots, N$) et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (eq. 2.10) où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange. L'éq. 2.10 fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \bar{W} / W_k$. Exprimée en terme de fractions massique et molaire, l'éq. 2.10 devient l'éq. 2.11.

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_{i,k} = 0 \quad (2.9)$$

$$X_k V_{i,k} = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

$$Y_k V_{i,k} = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

Si on somme les k éq. 2.11, la conservation de la masse totale exprimée par l'éq. 2.9 n'est pas nécessairement respectée. On ajoute alors la contribution d'une vitesse de diffusion corrective V^c pour assurer la conservation de la masse totale de gaz (eq. 2.12). Le flux de diffusion des espèces J_k qui prend en compte cette correction est défini par l'éq. 2.13.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.12)$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k (V_{i,k} + V_i^c) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (2.13)$$

2.2. 2) Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total q est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces. Ces deux termes sont détaillés dans l'éq. 2.15.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_k \quad (2.14)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_k}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (2.15)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie dans l'éq. 2.17. On néglige dans ce travail le rayonnement thermique. Les travaux d'Amaya (2010) ont montré que cette hypothèse est acceptable, dans un premier temps, car l'étude ne porte pas sur l'étude de la thermique, ni de la création de suies.

2.2. 3) Viscosité

Une approximation courante pour un mélange de plusieurs espèces et de considérer la viscosité dynamique μ indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air¹. La loi puissance (eq. 2.16) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.16)$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} . L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0 (air : $b = 0.76$).

¹Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est un gaz parfait

La conductivité thermique du mélange est définie par l'éq. 2.17 qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant et le $\overline{C_p}$ moyen du mélange défini en eq. 2.19.

La diffusivité thermique est définie par l'éq. 2.18.

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \quad (2.17)$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \quad (2.18)$$

$$\overline{C_p} = \sum C_{p,k} Y_k \quad (2.19)$$

La diffusivité moléculaire D_k est alors définie pour chaque espèce à partir de son nombre de Schmidt Sc_k supposé constant :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.20)$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant.

Pr et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire.

3 La Turbulence

Le but de cette partie est de présenter très brièvement, la turbulence et ses caractéristiques afin d'introduire la notion de Simulation aux Grandes Échelles et les modèles associés.

3.1 D'où vient la turbulence?

Les termes associés à la turbulence sont les termes non linéaires dans les équations de Navier-Stokes. Tant que ces termes non linéaires restent négligeables devant les autres termes de l'équation, notamment des termes de diffusion, l'écoulement est laminaire ou pseudo laminaire. A l'inverse si ces termes deviennent prépondérants, l'écoulement transitionne vers la turbulence : c'est à dire l'apparition de structures tourbillonnaires d'échelles très différentes et qui interagissent entre elles. Afin de quantifier la turbulence dans un écoulement, on définit le nombre de Reynolds comme le rapport des forces d'inertie sur les forces visqueuses :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.21)$$

où U est une vitesse caractéristique de l'écoulement, L une longueur caractéristique, et ν la viscosité cinématique.

3.2 Un phénomène multi-échelles

La théorie de la cascade d'énergie consiste à décomposer les échelles de la turbulence en trois groupes :

- Les grandes échelles de l'écoulement, appelées échelles intégrales, contiennent la majeure partie de l'énergie cinétique turbulente de l'écoulement, et sont caractéristiques des processus de génération de turbulence.
- Les échelles intermédiaires de turbulence, appelées échelles inertielles, présentent une distribution spectrale d'énergie en décroissance linéaire de pente $-\frac{5}{3}$ sur une échelle logarithmique comme sur la Fig. 2.1, phénomène appelé cascade énergétique ([Richardson \(1922\)](#)).
- Les petites échelles de l'écoulement, appelées échelles de Kolmogorov, dissipent finalement l'énergie.

L'existence de ces 3 gammes d'échelles de turbulence dans un écoulement impose des contraintes numériques fortes avec une taille de maille minimale inférieure à l'échelle de Kolmogorov si on souhaite tout résoudre. Diverses méthodes ont donc vu le jour pour contourner cette difficulté.

3.3 Approche numérique de la Turbulence

3.3. 1) Les grandes échelles

On distingue trois familles principales de méthode pour la résolution d'écoulements turbulents, qui diffèrent par le choix des échelles résolues et par l'approche de modélisation :

- La Simulation Numérique Directe (ou DNS pour Direct Numerical Simulation en anglais) résout toutes les échelles de la turbulence, aucun modèle n'est nécessaire ici, ce qui induit une taille de maille inférieure à l'échelle de Kolmogorov.
- La méthode RANS (pour Reynolds-Averaged Navier-Stokes) ne s'intéresse qu'à la moyenne d'ensemble de l'écoulement sans représenter les différentes échelles de la turbulence dont l'effet est modélisé.
- La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES pour Large Eddy Simulation en anglais) est une méthode intermédiaire entre les deux précédentes et consiste à appliquer un filtre passe-bas. Ce filtrage induit donc une séparation entre les grandes échelles et les petites de la turbulence, à une certaine fréquence de coupure. Dans ce cas, seules les grandes échelles sont explicitement résolues, et l'effet des plus petites échelles est évalué à partir de modèles.

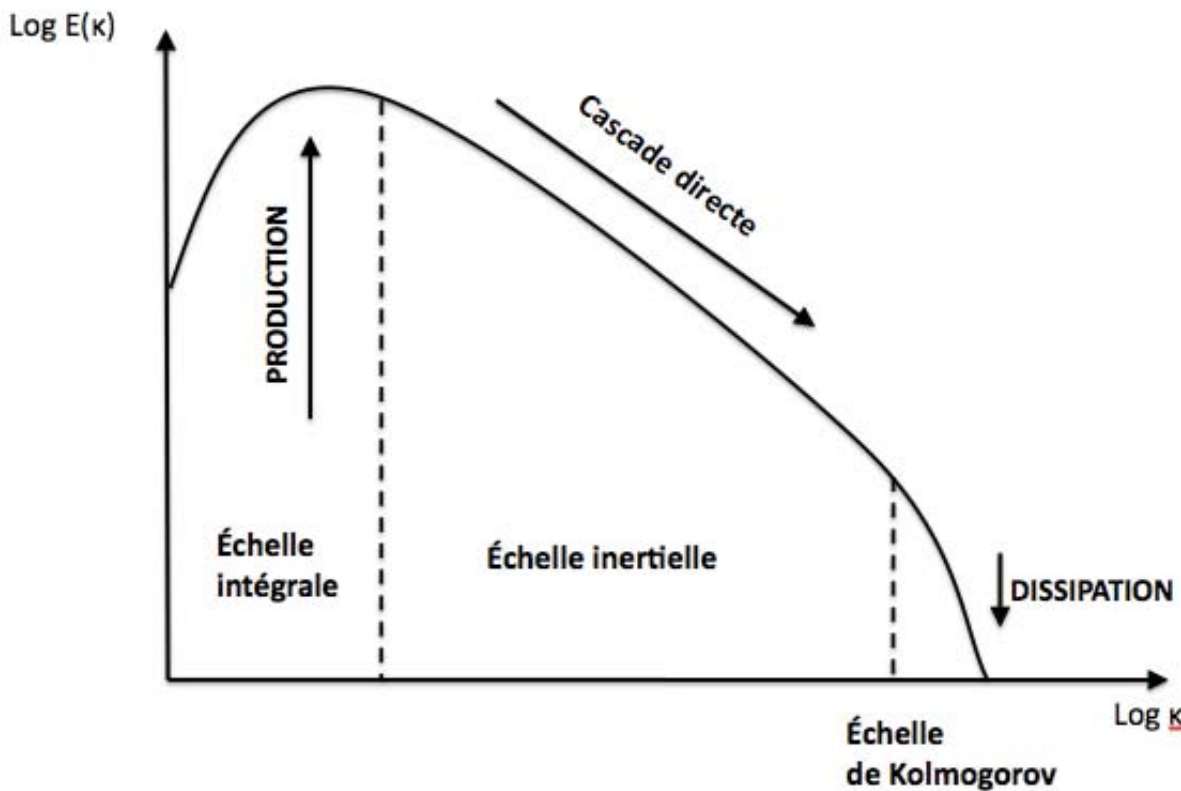


Figure 2.1: Représentation conceptuelle des différentes échelles de la théorie de la cascade d'énergie

Une façon de hiérarchiser les différentes approches est basée sur la plage d'échelles résolues : aucune dans le cas du RANS, mais les grandes échelles dans le cas de la LES, différence illustrée par la Fig. 2.2 montrant le spectre d'énergie d'un champ turbulent homogène isotrope (THI).

Grâce à la séparation d'échelles, la LES permet une représentation dynamique des tourbillons de plus grande taille dont les contributions sont critiques pour les écoulements au sein de géométries complexes. La physique des écoulements turbulents est ainsi mieux prédite et tous les phénomènes de grande échelle sont intrinsèquement représentés.

Pour ces raisons, la LES présente un grand potentiel pour les écoulements turbulents réactifs que l'on rencontre dans les applications industrielles. Cependant, la modélisation, qui ne concerne que les petites échelles, aura un impact fort sur la combustion, qui se passe aux échelles de sous maille.

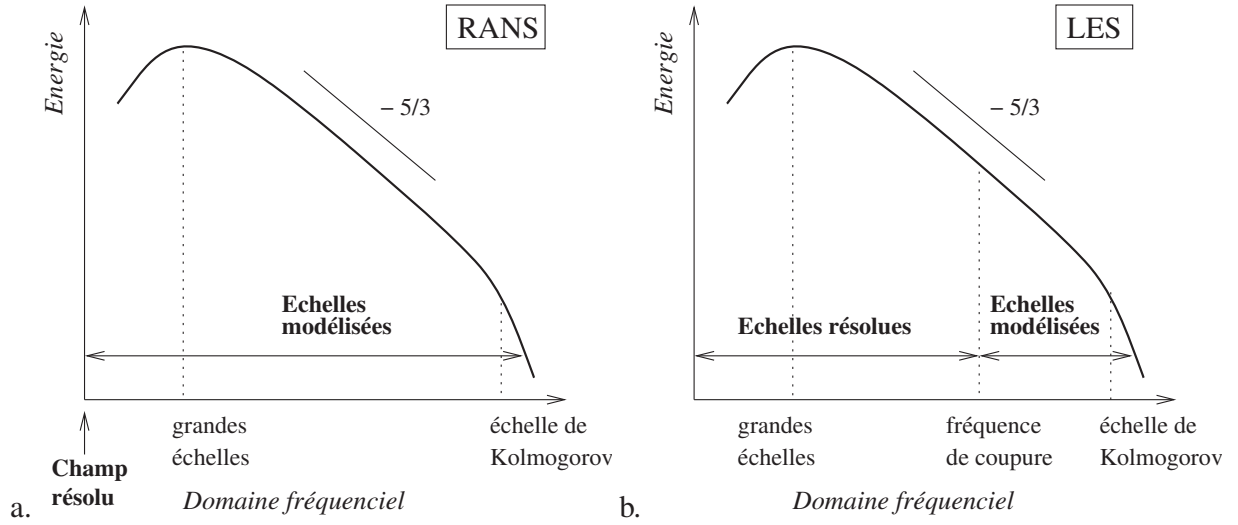


Figure 2.2: Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et LES (b.) pour une Turbulence Homogène Isotrope

3.3. 2) Les petites échelles en LES

Le filtrage des équations de Navier-Stokes fait apparaître des termes de sous maille, décrivant entre autres l'interaction entre les échelles résolues et non résolues. Cette interaction est modélisée par un gradient associé à une viscosité turbulente ν_t selon l'hypothèse de Boussinesq qui lui donne un caractère purement dissipatif. Cette hypothèse est en accord avec la théorie de la turbulence pour les petites échelles. De nombreux modèles pour ν_t existent dans la littérature, on n'en présente ici que deux.

Modèle de Smagorinsky

Le modèle de Smagorinsky (Smagorinsky (1963)) a été développé dans les années 60 et testé dans de nombreuses configurations :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} \quad (2.22)$$

où S_{ij} est le tenseur de déformation et Δ est la taille du filtre (liée au volume de la cellule V_e par : $\Delta = (V_e)^{1/3}$) et C_S une constante du modèle. La valeur C_S peut aller de 0.1 à 0.18 en fonction de l'écoulement. Cependant, ce modèle est bien souvent trop dissipatif (Germano et al. (1991); Sagaut (1998)) et tend à relaminariser de manière artificielle l'écoulement dans les zones de fort gradient moyen (zones de cisaillement ou proche paroi). Il reste communément utilisé pour sa simplicité.

Modèle WALE (Wall Adaptive Linear Eddy)

Ce modèle (Ducros et al. (1998)) a été développé pour améliorer le comportement dans les couches limites. La viscosité turbulente ν_t est formulée pour tendre vers zéro de manière asymptotique dans les couches limites turbulentes. La viscosité turbulente est définie ainsi :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S_{ij} S_{ij}})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (2.23)$$

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3}\tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (2.24)$$

où Δ est la taille du filtre, $C_w = 0.4929$ est la constante du modèle et \tilde{g}_{ij} est le gradient de vitesse résolue.

4 Combustion

La combustion est un ensemble de réactions d'oxydation, généralement exothermiques, qui présente un caractère fortement non linéaire. De ce fait, le couplage entre des équations simulant une phase fluide et la chimie est très fort et complexe. La partie suivante présente quelques généralités sur la combustion, les régimes de combustion et la chimie. En particulier, certains outils d'analyse qui seront utilisés dans ce manuscrit sont introduits.

4.1 Généralités sur les régimes de combustion

Les flammes présentes dans les foyers industriels sont extrêmement complexes du fait des modes d'injection et de la complexité des écoulements. On distingue deux régimes de combustion : la combustion prémélangée, où les réactifs sont mélangés avant de brûler et la combustion non-prémélangée ou flamme de diffusion, où le mélange a lieu au niveau de la flamme (Fig. 2.3). Dans les foyers aéronautiques, on trouve généralement une flamme essentiellement prémélangée (ou partiellement prémélangée et très peu de flammes de diffusion).

Dans le cas d'une réaction irréversible entre deux constituants (un carburant noté F et un oxydant noté O), explicitée sous la forme d'équation en 2.25, on définit le rapport stoechiométrique de masse par la formule de l'équation 2.26 :



$$s = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} \quad (2.26)$$

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (2.27)$$

où ν'_F , ν'_O et ν''_P sont les coefficients stoechiométriques du carburant, de l'oxydant et du produit de la réaction. On définit aussi la richesse d'un mélange comme explicitée dans l'équation 2.27

4.1. 1) Combustion prémélangée

Comme son nom l'indique, la combustion prémélangée résulte d'un mélange préalable entre le carburant et l'oxydant. La zone de réaction est alors une interface fine qui sépare les gaz frais et les gaz brûlés. Une combustion riche ($\phi > 1$) implique la présence de carburant dans les gaz brûlés, ce qui en plus d'induire une perte énergétique, crée aussi des imbrûlés. Une flamme prémélangée est capable de remonter l'écoulement (car composé d'un mélange inflammable). Cette propriété est essentielle pour l'allumage et la stabilisation, mais peut être gênante dans le cas de flashback.

4.1. 2) Combustion non prémélangée

Quand le carburant et l'oxydant ne sont pas mélangés au préalable mais sont séparés, la combustion a lieu lorsque les deux réactifs entrent en contact, et est maximale à la stoechiométrie. Le cas de la flamme étirée est intéressant car l'écoulement de part et d'autre de la flamme compense les flux diffusifs et permet d'établir une flamme stationnaire. Si la chimie de la combustion est suffisamment rapide, la flamme est contrôlée par la diffusion. Dans la mesure où la combustion se fait à la stoechiométrie, ces flammes atteignent des températures élevées, sources de points chauds dans lesquels les oxydes d'azote se forment.

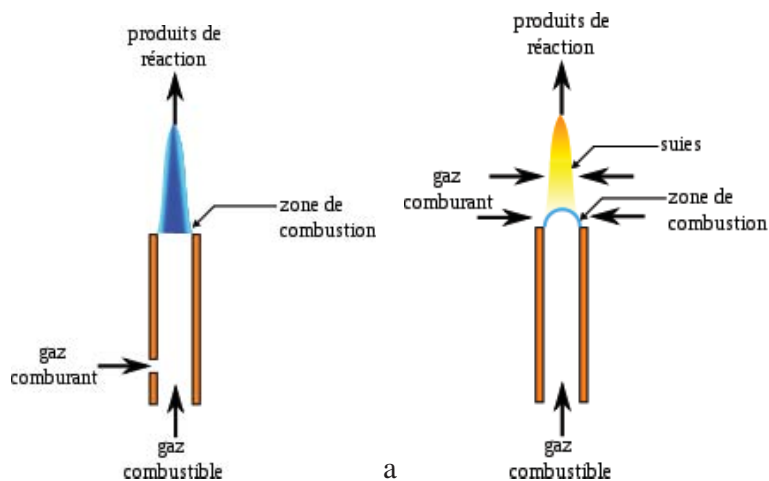


Figure 2.3: Combustion prémélangée (a) et non prémélangée (b), avec un bec Bunsen

Ce régime de combustion peut être représenté dans un diagramme température-fraction de mélange, ou fraction massique de carburant-fraction de mélange comme sur la Fig. 2.4. On définit

la fraction de mélange basée sur la conservation de l'atome de carbone en éq 2.28, où les exposants F et O sont relatifs au carburant et à l'oxydant.

$$z = \frac{Y_C - Y_C^O}{Y_C^F - Y_C^O} \quad (2.28)$$

Dans le cas de la chimie infiniment rapide, on obtient des droites de part et d'autre du point stoechiométrique où se fait la combustion instantanée.

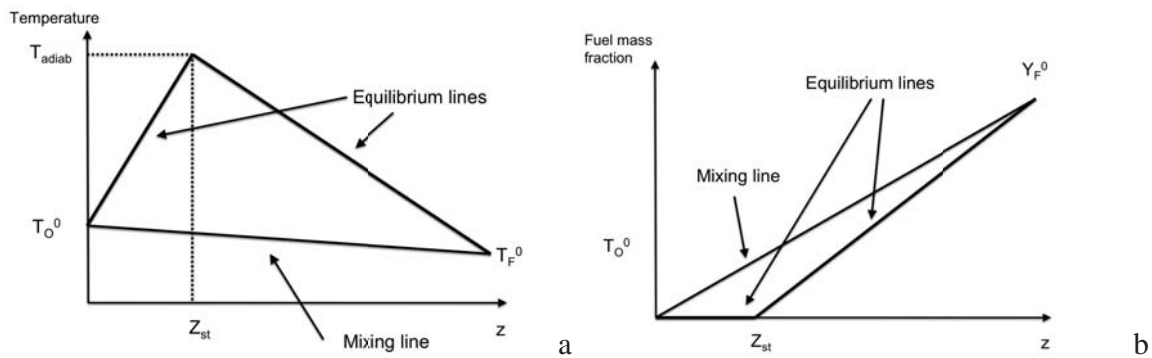


Figure 2.4: Diagramme température (a) et fraction massique de carburant (b) en fonction de la fraction de mélange, pour une chimie infiniment rapide irréversible

4.2 Chimie

La description de la chimie de la combustion est souvent réduite à une unique réaction, irréversible, comme nous l'avons fait ci-dessus. En réalité, la combustion comprend de nombreuses réactions, avec des temps chimiques caractéristiques très variés, et de nombreuses espèces. Certains logiciels dédiés à la combustion 0D ou 1D sont capables de gérer un tel nombre de réactions chimiques (Chemkin, etc...). Néanmoins, dans le cadre d'écoulements complexes et turbulents, le transport d'un grand nombre d'espèces et la résolution de réactions chimiques raides deviennent prohibitifs. Plusieurs méthodes existent pour réduire les schémas cinétiques (Turanyi (1990); Tomlin et al. (1997); Lu and Law (2005)). Elles doivent permettre de conserver la vitesse de flamme laminaire, pour conserver une vitesse de consommation réaliste, ainsi que la température de fin de combustion et le délai d'autoallumage. Des défauts sont souvent associés à ces schémas réduits :

- La surestimation de la température et de la vitesse de flamme pour des richesses supérieures à 1 dans le cas de chimie à 2 étapes.
- La mauvaise prédiction des polluants et des suies, conséquence directe de la réduction du nombre d'espèces.

- L'absence de radicaux (espèce à faible durée de vie mais fort pouvoir chimique) nécessaires à la description de l'allumage comme le OH ou le HO_2

Des fonctions de correction sont utilisées comme le schéma 2S_KERO_BFER de [Franzelli et al. \(2010\)](#) et une correction de type PEA qui modifie la constante pré-exponentielle dans les zones riches, afin d'obtenir la bonne vitesse de flamme et température. Cette méthode a été utilisée pour l'ensemble des calculs réactifs de cette étude.

4.2. 1) Description de la cinétique chimique

Les termes sources $\dot{\omega}_k$ de l'éq. 2.2 (le taux de réaction de l'espèce k) et $\dot{\omega}_T$ de l'éq. 2.6 (le taux de dégagement de chaleur) sont définis dans cette section. Ils suivent tous une loi d'Arrhénius écrite pour N espèces \mathcal{M}_{kj} et M réactions. Les réactions se mettent sous la forme définie par l'éq. 2.29. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'éq. 2.30 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ de l'espèce k dans chaque réaction j , j variant de 1 à M . Les coefficients stoechiométriques des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$. \mathcal{Q}_j est le taux d'avancement de la réaction j définie par l'éq. 2.31. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par les éq. 2.32 et 2.33. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ est imposé par l'hypothèse d'équilibre thermodynamique.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (2.29)$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.30)$$

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.31)$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^j \exp \left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T} \right) \quad (2.32)$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq,j}} \quad (2.33)$$

$$K_{eq,j} = \left(\frac{p_a}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right) \quad (2.34)$$

où $p_a = 1\text{bar}$. ΔH_j^0 et ΔS_j^0 sont l'enthalpie (sensible et chimique) et l'entropie totale de la réaction j :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.35)$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (2.36)$$

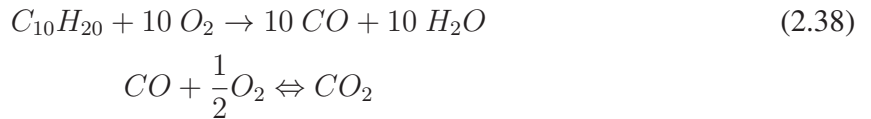
où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie massique de formation de l'espèce k à la température de référence $T_0 = 0K$.

Finalement, le dégagement de chaleur généré par la combustion est :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.37)$$

4.2. 2) La cinétique réactionnelle du kérosène

La composition précise du kérosène n'est pas connue et varie selon la source et le procédé de raffinage. Il contient un grand nombre d'espèces, dont quelques-unes sont majoritaires ($C_{10}H_{22}$ pour le n-décane, C_9H_{12} pour Propylbenzène, C_9H_{18} pour Propylcyclohexane par exemple). Dans cette étude, le kérosène est simplement représenté par l'espèce majoritaire ($C_{10}H_{20}$), avec des caractéristiques de transport et thermodynamiques proches du kérosène. Le schéma cinétique est le mécanisme 2S_KERO_BFER pour la combustion kérosène/air (Franzelli et al. (2010)) à 2 étapes et 6 espèces, explicité dans l'éq 2.38, issu de la réduction du schéma détaillé de Luche et al. (2004). La prise en compte de l'équilibre CO-CO₂ est déterminante pour une bonne estimation de la température adiabatique de fin de combustion riche (ϕ entre 1 et 1,4).



Pour reproduire la vitesse de flamme laminaire du côté riche, on ajuste la constante pré-exponentielle en fonction de la richesse (méthode PEA Légier (2001)) :

$$K_{f,j} = f_c(\phi) A_{f,j} T^j \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \quad (2.39)$$

où $f_c(\phi)$ est la fonction de correction qui dépend de la richesse ϕ .

La Figure 2.5 représente l'évolution de la vitesse de flamme et de la température adiabatique en fonction de la richesse, pour des gaz frais à la température $T_f = 473 K$ et compare le schéma

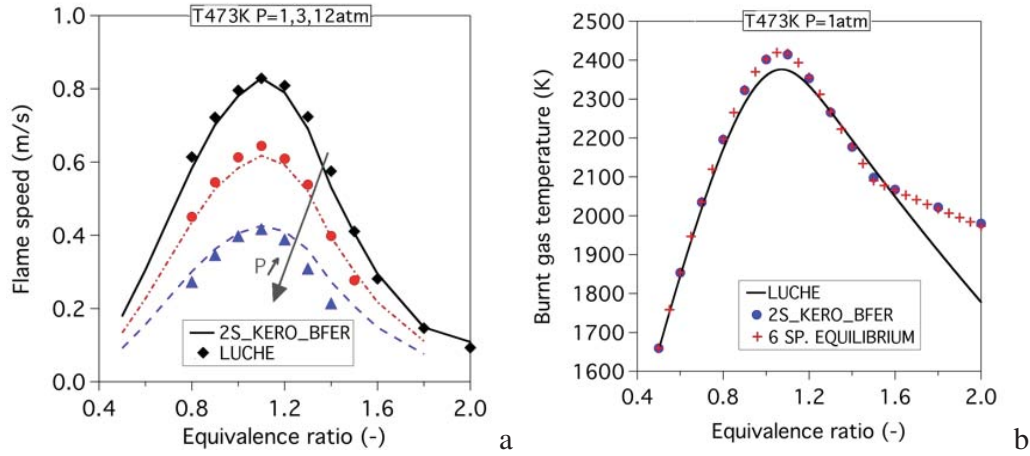


Figure 2.5: Vitesse de flamme laminaire (a) et de température adiabatique de fin de combustion (b) pour le schéma 2S_KERO_BFER et le schéma détaillé de référence (Franzelli et al. (2010))

2S_KERO_BFER au schéma détaillé de Luche et al. (2004). En termes de vitesse, les résultats sont en plus présentés pour 3 pressions $p = 1, 3$ et 12 atm, et montrent un bon accord, tant en régime pauvre qu'en riche, sur toute la gamme de richesses et de pressions. En termes de température, on note un bon accord entre le schéma réduit et le calcul d'équilibre avec les 6 espèces retenues. Cependant, on note une surestimation de l'ordre de 50K autour de la stoechiométrie, et une large surestimation pour des richesses $\phi > 1.4$, la dissociation de H_2 en H négligée dans le schéma 2S_KERO_BFER devenant non négligeable. Les mêmes résultats sont obtenus pour une gamme de température gaz frais $T_f \in [300\text{ K}; 700\text{ K}]$.

Ce schéma cinétique réduit sera utilisé dans tous les calculs réactifs de cette thèse (banc MERCATO, chapitre 6 et brûleur TLC, annexe 6)

4.3 Modélisation de la combustion turbulente

Il existe de nombreux différents modèles de combustion dont on peut trouver une synthèse par Veynante and Vervisch (2002); Poinso et Veynante (2011). L'intégralité des modèles ne sera pas exposée ici, mais le modèle de flamme épaissie utilisé dans les simulations réactives de cette étude est introduit. Dans le contexte de la Simulation aux grandes échelles, on peut citer deux groupes principaux de modèles de combustion :

- les descriptions géométriques : le modèle à G-equation décrit la flamme comme une surface géométrique (Kerstein et al. (1988)); la notion de densité de surface de flamme permet également de décrire la flamme comme une surface mince (Fichot et al. (1993); Vervisch et al. (1995); van Kalmthout and Veynante (1998)). On lui associe un plissement de sous-maille

pour modéliser l'interaction avec la turbulence des petites échelles (Weller et al. (1990); Gulder and Smallwood (1995)).

- les approches statistiques sont basées sur les fonctions de densité de probabilité. Ces dernières peuvent être présumées (Libby and Williams (1994)). L'approche Conditional Moment Closure, (Bilger (1993); Klimenko and Bilger (1999)) utilise des fonctions de densité de probabilité conditionnées par la variable de progrès ou la fraction de mélange (Mastorakos et al. (1997); Garmory and Mastorakos (2011)).

Pour permettre la résolution du front de flamme, Butler and O'Rourke (1977) ont proposé le modèle de flamme épaissie : si la diffusivité thermique est multipliée par un facteur d'épaississement noté F , et que la constante pré exponentielle de la réaction est divisée par ce même facteur, l'épaisseur de flamme laminaire elle aussi est multipliée par F , ce qui permet la résolution de la flamme, alors que la vitesse de flamme laminaire reste inchangée. Dans le cas turbulent, cette modification peut induire une erreur sur l'interaction entre la flamme et la turbulence, en particulier pour des grands nombres de Damköhler. De plus, le plissement de la flamme par les tourbillons de sous maille est omis ce qui induit une réduction artificielle de la surface de flamme, et cause une sous estimation du taux de réaction comme indiquée sur la figure 2.6. C'est pourquoi l'ajout d'une fonction d'efficacité \mathcal{E} , basée sur des résultats de DNS, a été introduit par Colin et al. (2000), puis par Charlette et al. (2002). Son utilisation a fait l'objet de nombreux travaux et de nombreuses publications (Roux et al. (2005); Sengissen et al. (2007); Selle et al. (2004)).

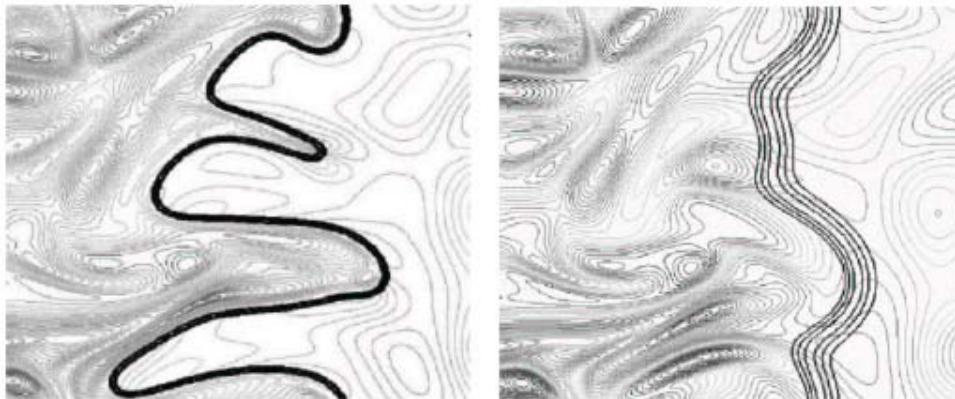


Figure 2.6: Effet sur le plissement de la flamme du modèle de flamme épaissie a) Flamme non épaissie b) Flamme épaissie, extrait de Poinsot and Veynante (2011)

Le modèle de flamme épaissie est applicable en théorie seulement pour des flammes parfaitement prémélangées. Pour des flammes partiellement prémélangées, il doit être modifié car dans les

zones non réactives où seul le mélange a lieu, les diffusions thermique et moléculaire ne doivent pas être modifiées.

Le modèle d'épaississement dynamique a donc été développé (Légier et al. (2000)) où le facteur d'épaississement n'est plus constant et varie de 1 à \mathcal{F}_{max} (des zones non réactives vers les zones réactives) de la façon suivante :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{max} - 1)\mathcal{S} \quad (2.40)$$

où \mathcal{S} est un senseur dépendant de la température locale et de la fraction massique allant de 0 (pour les zones non réactives) à 1 (dans la flamme), et s'écrit :

$$\mathcal{S} = \tanh(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}) \quad (2.41)$$

où Ω est une fonction utilisée pour détecter le front de flamme. Ω est construit à partir du schéma cinétique chimique :

$$\Omega = Y_F^{\nu_F'} Y_O^{\nu_O'} \exp(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}) \quad (2.42)$$

et Ω_0 est le maximum de la fonction Ω .

La constante Γ_T est là pour activer l'épaississement juste avant le taux de réaction, et vaut en général 0.5. Le facteur β' a une valeur typiquement de 50. Dans le cas du schéma cinétique 2S_KERO_BFER à deux étapes de Franzelli et al. (2010), l'auteur propose de baser le senseur non pas sur la première réaction mais sur la réaction d'oxydation du CO_2 . On appliquera cette méthode pour tous les calculs réactifs de la thèse.

Le code AVBP

Le code AVBP co-développé depuis près de 20 ans par le CERFACS et IFPEN est dédié à la simulation des écoulements compressibles turbulents réactifs instationnaires sur des maillages non structurés. L'approche récente de Simulation aux Grandes Echelles bien adaptée à la résolution d'écoulements instationnaires dans des géométries complexes est utilisée. Deux approches sont disponibles pour prendre en compte l'injection liquide de carburant : une approche Euler-Lagrange qui résout les trajectoires des gouttes, et une approche mésoscopique Euler-Euler (Février et al., 2005; Kaufmann, 2004; Riber, 2007) qui considère la phase liquide comme une phase continue.

Le code AVBP est un solveur utilisant une formulation spatiale dite cell-vertex (pour discrétisation cellule-sommet). Les inconnues sont stockées aux noeuds du maillage et les bilans de conservation sont établis aux cellules primaires du calcul. Les résidus sont ensuite redistribués aux noeuds du maillage pour avancer les variables. Cette discrétisation est très adaptée au parallélisme

du code puisqu'elle limite les passages d'information entre les blocs de maillage. La pondération des résidus doit assurer une bonne précision même sur des maillages irréguliers (Lamarque, 2007).

L'intégration temporelle est explicite, ce qui assure une parallélisation du code plus aisée. La stabilité des schémas de convection est alors assurée par la condition CFL. Dans sa thèse, Lamarque (2007) a calculé le nombre CFL critique pour l'ensemble des schémas disponibles dans AVBP par une analyse monodimensionnelle de stabilité. Les nombres CFL critiques sont proches de l'unité pour les schémas les plus couramment utilisés dans AVBP. Pour s'assurer que les calculs 3D restent bien dans le domaine de stabilité, le nombre CFL est en pratique limité à 0.7.

Plusieurs schémas numériques de convection sont implantés dans AVBP. Les calculs présentés et analysés dans cette thèse sont réalisés principalement avec le schéma centré éléments-finis TTGC (Colin and Rudgyard (2000)). Ce schéma est d'ordre 3 en espace et en temps. L'intégration temporelle est réalisée en deux étapes par une méthode de prédiction-correction. Ce schéma a été spécialement développé pour AVBP et permet d'assurer une bonne précision sur les maillages non-structurés, pour tout type d'éléments (tétraèdres, hexaèdres, pyramides, prismes, ...) et pour un coût en temps de calcul raisonnable comparativement à d'autres schémas de même précision (Colin and Rudgyard (2000)).

La discrétisation des termes de diffusion dérive d'une méthode éléments-finis et conduit à une discrétisation dite vertex-centered (centrée aux sommets) et à un stencil à 2Δ , Δ étant la taille de maille caractéristique, pour l'opérateur de diffusion. Cet opérateur de diffusion permet de dissiper toutes les échelles énergétiques résolues sur la grille de calcul. En particulier, il agit comme un filtre sur les plus hautes fréquences, appelées wiggles, qui sont des oscillations numériques noeud à noeud.

Les termes sources de couplage entre les phases peuvent être calculés directement aux noeuds pour avancer directement le vecteur des variables, mais ne correspondent pas à la formulation cell-vertex exacte (Lamarque, 2007). Dans AVBP, ils sont à présent calculés au centre des cellules puis redistribués aux noeuds pour améliorer la précision des calculs.

Le schéma de convection TTGC est centré en espace. Il est également très peu dissipatif. Il génère par contre des oscillations hautes fréquences ou wiggles dans les zones de forts gradients. Dans le cas du transport des variables gazeuses, l'opérateur de diffusion n'est parfois pas suffisant pour les dissiper complètement. Dans le cas du transport des variables de la phase liquide dans l'approche Euler-Euler mésoscopique, lorsque le mouvement décorrélié des particules est négligé, il n'y a pas de termes de diffusion. L'emploi de diffusion artificielle, ou viscosité artificielle, permet de limiter efficacement l'effet dispersif des schémas centrés. En suivant l'idée de Jameson et al. (1981), une combinaison linéaire d'opérateurs de viscosité (ordre 2) et d'hyperviscosité (ordre 4) est ajoutée aux résidus (Colin and Rudgyard, 2000) pour aider à la résolution des gradients en les adoucissant. Pour repérer efficacement les oscillations numériques et appliquer cette dissipation artificielle localement afin de ne pas dégrader la précision du schéma numérique dans tout le domaine de calcul, un senseur d'application de cette viscosité, c'est-à-dire une fonction qui varie entre 0 et 1, basée sur les gradients des variables transportées est utilisé.

En termes de conditions aux limites, la résolution des équations de Navier-Stokes compressibles nécessite l'utilisation de l'approche NSCBC ([Poinsot and Lele, 1992](#)) pour maîtriser la propagation des ondes acoustiques depuis leur source dans le domaine jusqu'aux frontières du domaine mais également leur réflexion éventuelle sur les parois et les sorties du domaine. Dans le cas des équations de la phase dispersée, cette difficulté ne se pose pas puisqu'il n'existe pas de phénomènes acoustiques et des conditions aux limites de type Dirichlet sont utilisées. Des modèles de lois de parois sont par ailleurs disponibles ([Schmitt, 2005](#); [Jaegle et al., 2010](#)) pour la phase gazeuse. Pour le traitement des gouttes à la paroi, un modèle de rebond élastique est implanté pour l'approche Euler-Lagrange. Pour le formalisme Eulérien, ce comportement est moins évident à prendre en compte et de simples modèles de glissement sont utilisés.

Enfin, plusieurs modèles de combustion sont disponibles, mais le modèle de flamme épaissie TFLES ([Colin et al., 2000](#)) reste aujourd'hui principalement utilisé.

Chapitre 3

Equations de conservation pour la phase dispersée

Bien qu'une grande majorité des écoulements fluides soient décrits par une approche continue, qu'on nomme approche Eulérienne, la description d'une phase dispersée peut être abordée par deux formalismes différents : le premier est le formalisme Lagrangien qui suit chaque particule individuellement dans son repère de référence. Le second est le formalisme Eulérien, qui considère le spray comme une phase continue, dans laquelle les échanges de masse, quantité de mouvement, chaleur sont transcrits d'un point de vue statistique, analogue à ce qui est utilisé pour la phase gazeuse. De nombreux formalismes Eulériens existent, ici l'approche Eulérienne mésoscopique est développée dans AVBP. Dans ce chapitre, on présente brièvement les modèles pour les sprays. Puis, les approches Lagrangienne et Eulérienne mésoscopique sont décrites. Les termes d'échanges avec le gaz utilisés, identiques pour les deux approches sont finalement présentés.

Note : Dans la suite du manuscrit, on parlera de phase dispersée pour le spray, ou encore de phase liquide, mais aussi de gouttes ou particules pour qualifier cette même phase. La phase gazeuse est nommée gaz ou encore phase porteuse.

Sommaire

1	Le formalisme Lagrangien	69
1.1	<i>Equations de Basset-Boussinesq-Oseen</i>	69
1.2	<i>Force de traînée de Stokes</i>	71
1.3	<i>Interaction entre la phase porteuse et la phase dispersée</i>	72
1.4	<i>Evaporation d'une particule isolée</i>	74
2	Le formalisme Eulérien mésoscopique	79
2.1	<i>De l'équation de Boltzmann vers celle d'Enskog</i>	80
2.2	<i>Equations de conservation</i>	83
2.3	<i>Fermeture des termes décorrélés</i>	85
2.4	<i>Modèle de sous maille pour la phase dispersée</i>	87
2.5	<i>Modèle de flamme épaissie diphasique de Boileau (2007)</i>	87

Le carburant étant stocké sous forme liquide, la simulation de l'injection liquide est critique pour reproduire fidèlement la transformation du carburant liquide pour la combustion. Le liquide passe par plusieurs étapes, notamment les atomisations primaire et secondaire qu'il faut caractériser. En proche injecteur, le jet liquide se fragmente grâce aux phénomènes d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz et Rayleigh-Taylor. Plus loin derrière l'injecteur, le liquide est constitué principalement de gouttes sphériques. Cet état de la phase liquide est appelé phase dispersée. Un grand nombre de phénomènes physiques a lieu sous cette forme, comme les interactions liquide-gaz, l'évaporation et la combustion.

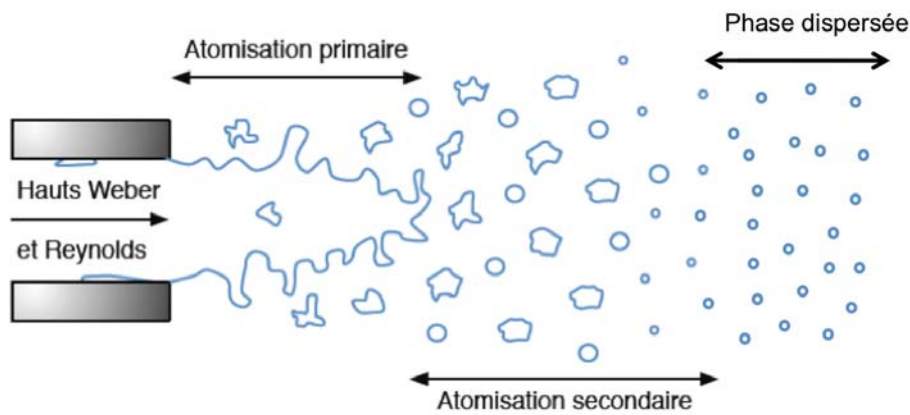


Figure 3.1: Schéma représentant le phénomène d'injection

De nombreuses méthodes sont disponibles pour décrire l'atomisation. Ce sont principalement des méthodes de suivi d'interface gaz-liquide. Elles consistent à résoudre l'écoulement dans le liquide et à l'interface avec le gaz, et nécessitent des méthodes numériques très précises. On peut citer par exemple les travaux de [Zhao et al. \(1996\)](#), [Sethian and Smereka \(2003\)](#), [Olsson and Kreiss \(2005\)](#), [Beau et al. \(2006\)](#) et [Herrmann \(2008\)](#) pour la méthode level-set, qui consiste à représenter l'interface par une fonction scalaire égale à la distance à l'interface, la valeur zéro représentant l'interface. La méthode VOF (pour Volume Of Fluid) définit elle aussi un champ scalaire mais s'appuie sur un champ de fraction volumique liquide ([Fuster et al. \(2009\)](#); [Renardy and Renardy \(2002\)](#)). Enfin la méthode Ghost Fluid consiste à localiser les mailles coupées par l'interface, et à reconstruire les variables discontinues ([Desjardins et al. \(2008\)](#); [Trontin et al. \(2012\)](#)). Ces méthodes peuvent aussi être couplées pour profiter des avantages de chacune ([Menard et al. \(2007\)](#); [Cousin et al. \(2012\)](#)). Une illustration du processus d'injection capturé par cette méthode de couplage est présentée en Fig 3.2.

Dans le cadre de cette thèse, les simulations n'incluent pas les phénomènes d'atomisations primaire et secondaire, mais uniquement la phase dispersée, injectée selon une méthodologie décrite au chapitre 4.

Afin de simuler la phase dispersée, deux méthodes sont généralement utilisées. La formulation



Figure 3.2: Simulation du processus d'injection par une méthode suivi d'interface ([Menard et al. \(2007\)](#))

Lagrangienne calcule la trajectoire de chaque goutte dans l'écoulement, évaluant sa position et sa vitesse. Elle présente quelques inconvénients. D'une part, la différence de formalisme entre les phases gazeuse et liquide nécessite des méthodes d'interpolation précises pour décrire les échanges entre les deux phases. D'autre part, la décomposition en domaines pour la parallélisation du calcul est bien adaptée pour la phase gazeuse, elle ne l'est pas nécessairement pour le champ discret de particules. C'est notamment le cas dans une chambre de combustion où les particules sont proches de l'injecteur.

La deuxième méthode est l'approche Eulérienne. Elle consiste à considérer la phase liquide comme une phase continue, dont elle capture les quantités moyennes (au sens moyenne sur les particules) ([Ferry and Balachandar \(2002\)](#)). Différents formalismes existent ; ils peuvent être volumiques ([Whitaker \(1999\)](#)) ou statistiques ([Simonin \(1991\)](#)), aboutissant tous deux à un système d'équations de conservation similaire au système gazeux. La formulation continue d'une phase dispersée simplifie considérablement les échanges avec la phase gazeuse (pas d'interpolation). Le coût CPU n'est plus dépendant du nombre de particules, mais du nombre de mailles et d'équations à résoudre. Aucune contrainte supplémentaire n'apparaît en ce qui concerne la parallélisation. Cependant, les approches Eulériennes nécessitent plus d'efforts de modélisation.

On s'intéresse ici aux formalismes statistiques. Les modèles Eulériens statistiques sont dérivés à partir de l'équation de Boltzmann soumis à certaines hypothèses, et à diverses méthodes d'intégration. Le modèle bi-fluide est le plus simple : la phase liquide est définie par la densité en nombre de gouttes, sa masse et sa vitesse. Il est donc monodisperse en vitesse et en taille. Le formalisme Eulérien Mésoscopique de [Février et al. \(2005\)](#) est une extension du modèle bi-fluide. Il décompose la vitesse particulaire en la somme de la vitesse d'ensemble, appelée vitesse corrélée ou mésoscopique, et une vitesse propre à chaque particule, appelée vitesse décorrélée. De nombreux travaux ont été réalisés en utilisant ce formalisme ([Simonin \(2002\)](#); [Kaufmann and Moreau \(2008\)](#)). Une décomposition identique est effectuée sur la température par [Masi et al. \(2008, 2010\)](#). La polydispersion en taille peut être prise en compte, en transformant l'approche bi-fluide en une approche multi-fluide. L'espace des tailles de gouttes est alors discrétisé en classes ([Laurent and Massot \(2001\)](#); [Laurent et al. \(2004\)](#)). Un couplage entre l'approche multifluide et le formalisme

Eulérien Mésoscopique de [Février et al. \(2005\)](#) est effectué par [Vié et al. \(2009\)](#) suite à des travaux de [Massot et al. \(2004\)](#). Quand les fonctions densité de probabilité évoluent peu, [Mossa \(2005\)](#) propose de présumer leur forme (par exemple une distribution log normale pour la distribution en taille, une distribution gaussienne pour la température et la vitesse) ce qui permet d'obtenir un spray polydisperse en taille et en vitesse. Dans le cas où la distribution est inconnue, des méthodes de quadrature permettent de reconstruire la fonction de densité de probabilité (approche QMOM), et donc les moments associés, en utilisant une quadrature de Gauss ([Marchisio et al. \(2003\)](#)). Un avantage de cette technique est qu'elle permet de prendre en compte le croisement des particules ([de Chaisemartin et al. \(2009\)](#)). [Marchisio and Fox \(2005\)](#) proposent de transporter les poids calculés par quadrature au lieu des moments (approche DQMOM) ce qui permet la prise en compte des phénomènes de coalescence et d'évaporation ([Fox et al. \(2008\)](#)). Cette approche a permis à [Belt and Simonin \(2009\)](#) de proposer un modèle de coalescence dans des écoulements turbulents qui a été évalué dans une Turbulence Homogène Isotrope par [Wunsch et al. \(2009\)](#). Néanmoins, toutes ces approches sont coûteuses, seule l'approche multifluide de [Vié et al. \(2009\)](#) a été mise en oeuvre dans une configuration de chambre aéronautique.

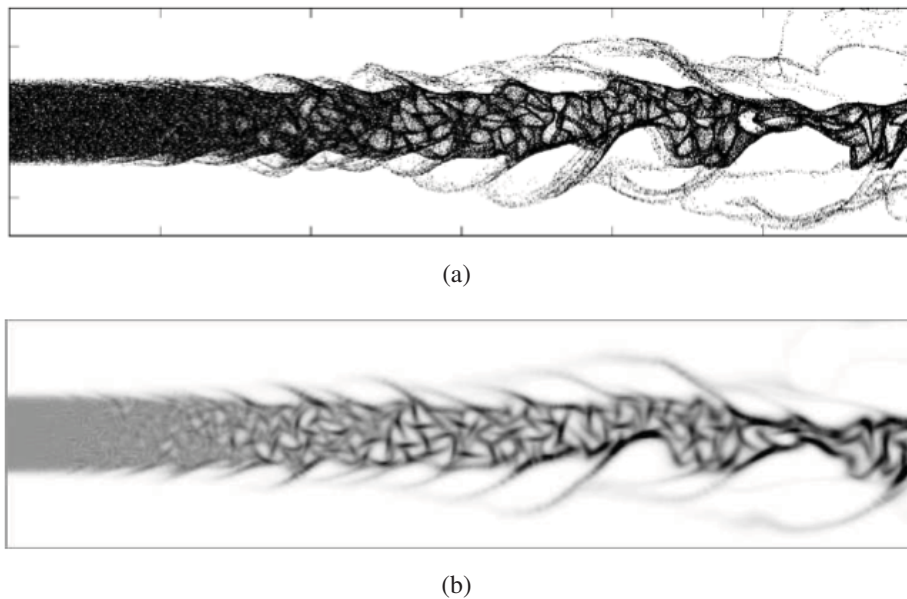


Figure 3.3: Comparaison des deux formalismes (a.) Euler/Lagrange (b.) Euler/Euler mésoscopique pour un jet plan 2D anisotherme ([Dombard \(2011\)](#))

De nombreuses études ont pour objet la comparaison des formalismes Euler/Euler et Euler/Lagrange. Des simulations de Turbulence Homogène Isotrope chargées en particules avaient été comparées par [Kaufmann \(2004\)](#); [Riber \(2007\)](#); [Vié et al. \(2009\)](#), et des simulations aux grandes échelles de spray évaporant dans la chambre MERCATO avaient été effectuées ([Sanjosé et al. \(2011\)](#); [Vie \(2010\)](#)). [Dombard \(2011\)](#) réalise un jet plan bidimensionnel anisotherme. Les

comparaisons ont montré de bons accords (Fig. 3.3). Des comparaisons dans des configurations similaires ont également été réalisées par [Massot et al. \(2004\)](#) en utilisant une approche multi-fluide. [Jaegle et al. \(2010\)](#) a réalisé des comparaisons tridimensionnelles évaporantes entre les deux formalismes et avec des expériences dans la chambre SNECMA TLC dont l'injection est réalisée via un injecteur multipoint composé d'un injecteur pilote et de 24 trous situés dans un swirler radial. Une description plus complète de la géométrie est fournie en Annexe 6. Un résultat de deux simulations est présenté en Fig 3.4. Les comparaisons confirment la capacité des deux formalismes à capturer la dynamique de spray en écoulements turbulents.

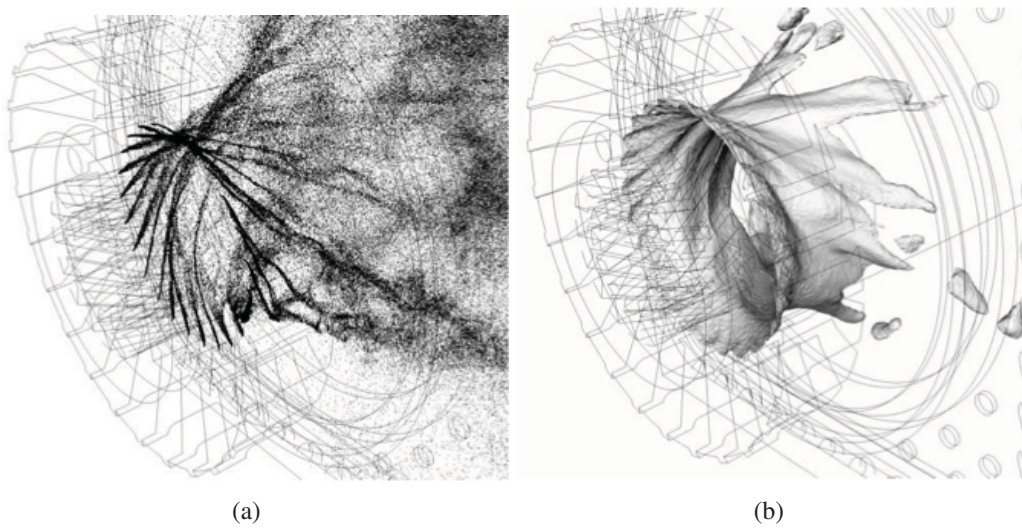


Figure 3.4: Comparaison des deux formalismes (a.) Euler/Lagrange (b.) Euler/Euler mésoscopique pour l'injection multipoint dans la chambre TLC ([Jaegle et al. \(2010\)](#))

1 Le formalisme Lagrangien

1.1 Equations de Basset-Boussinesq-Oseen

[Basset \(1888\)](#), [Boussinesq \(1903\)](#) et [Oseen \(1927\)](#) se sont intéressés à l'étude du déplacement d'une particule unique tombant sous l'effet de la gravité dans un fluide au repos. [Tchen \(1947\)](#) a amélioré leur travail en le généralisant au mouvement d'une sphère rigide dans un écoulement non uniforme. [Maxey and Riley \(1983\)](#) ont aussi apporté des corrections à certaines démonstrations de [Tchen \(1947\)](#). Le suivi d'une particule que l'on considère isolée, de forme sphérique, et rigide (pas de variation de la forme sphérique) dans son propre référentiel est ici considéré. On ne prendra en compte que le mouvement de translation de la particule (pas de rotation de la particule sur elle même). Les équations qui décrivent la trajectoire et la masse (constante ici) de la particule sont :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dt}(m_p u_{p,i}) = \int_{S_p} (-p\delta_{ij} + \tau_{ij}) n_j dS = F_{p,i} \quad (3.2)$$

où $x_{p,i}$ sont les coordonnées d'une particule, $u_{p,i}$ les composantes de sa vitesse, m_p sa masse et $F_{p,i}$ les forces extérieures.

La force $F_{p,i}$ qui s'exerce sur une particule est obtenue en intégrant les terme de pression et de contraintes visqueuses sur la surface de la particule. Cette force peut être décomposée en deux parties :

$$F_{p,i} = F_{p,i}^u + F_{p,i}^d \quad (3.3)$$

La composante qui représente la force exercée sur la particule par le domaine de fluide qui coïncide avec la particule est notée $F_{p,i}^u$. L'autre composante $F_{p,i}^d$ représente la force exercée sur la particule, par la perturbation du fluide générée par la particule. Pour exprimer ces deux composantes, une décomposition du champ de vitesse du fluide en une composante perturbée et une composante non perturbée est supposée, et l'hypothèse d'une taille de particule solide comme étant bien inférieure à la taille de l'échelle de Kolmogorov est faite. Avec ces hypothèses, la composante $F_{p,i}^u$, issue de l'écoulement gazeux non perturbé \check{u}_i , s'écrit :

$$F_{p,i}^u = \frac{\pi d_p^3}{6} \left[\rho \frac{D\check{u}_i}{Dt} \Big|_{x_i=x_{p,i}} - (\rho_p - \rho) g_i \right] \quad (3.4)$$

où d_p est le diamètre d'une particule, ρ la masse volumique du gaz et ρ_p la masse volumique de la particule. g_i l'accélération de la pesanteur et \check{u}_i définit la vitesse de l'écoulement non perturbé par la particule, et D/Dt représente la dérivée totale le long d'une trajectoire de fluide :

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \check{u}_j \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (3.5)$$

Finalement, une hypothèse de nombre de Reynolds particulaire faible est ajoutée :

$$Re_p = \frac{d_p |(u_{p,i} - u_{g,i})|}{\nu_g} \ll 1 \quad (3.6)$$

Pour l'autre composante $F_{p,i}^d$, une transformée de Laplace sur l'équation de quantité de mouvement de l'écoulement perturbé (Maxey and Riley (1983)) donne :

$$F_{p,i}^d = \frac{\pi d_p^3}{6} \left[\frac{18\rho_f \nu_f}{d_p^2} (\check{u}_i - u_{p,i}) + \frac{\rho_f}{2} \frac{d}{dt} (\check{u}_i - u_{p,i}) + \frac{9\rho_f}{d_p} \sqrt{\frac{\nu_f}{\pi}} \int_{-\infty}^t \frac{d}{d\tau} (\check{u}_i - u_{p,i}) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \right] \quad (3.7)$$

Le premier terme dans la partie droite de l'éq. 3.7 définit la force de traînée de Stokes (Stokes (1851)) utilisée dans ce travail. Le second terme définit la force de masse ajoutée, représentant la force additionnelle s'exerçant sur la particule due à l'accélération du fluide. Le troisième terme est la force d'histoire de Basset représentant le développement déphasé de la couche limite à la surface de la particule accélérée (Crowe et al. (1998)). Gatignol (1983) généralise les expressions précédentes en assimilant le diamètre de la particule à la plus petite échelle de l'écoulement fluide. Les expressions ainsi obtenues pour les forces $F_{p,i}^u$ and $F_{p,i}^d$ restent inchangées dans les éqs. 3.4 et 3.7, mais la vitesse de l'écoulement non perturbée \tilde{u}_i à la particule est remplacé par une vitesse du fluide non perturbée moyennée.

1.2 Force de traînée de Stokes

Le premier terme de traînée (eq. 3.7) correspond à la force définie par Stokes dans un fluide visqueux stationnaire, pour de faibles nombres de Reynolds particuliers. Si on introduit le coefficient de traînée C_d , la force peut être reformulée ainsi :

$$F_{p,i}^d = \frac{1}{8} \rho_f \pi d_p^2 C_d |(u_{p,i} - u_{g,i})| (u_{p,i} - u_{f,i}) \quad (3.8)$$

avec :

$$C_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} \quad (3.9)$$

L'hypothèse de faible nombre de Reynolds particulière permet de négliger les effets inertiels du fluide dans l'expression de la force de traînée. Une première correction est apportée par Oseen (1927), mais reste valide pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à 5. Des corrélations empiriques existent afin de couvrir un éventail plus large de nombre de Reynolds particulière, plus communément rencontrés dans la pratique. Ici on utilise celle de Schiller and Naumann (1935) :

$$C_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad \text{pour} \quad Re_p \leq 1000 \quad (3.10)$$

En faisant l'hypothèse de faibles diamètres de particules, et de particules denses ($\rho_p/\rho_f \sim \mathcal{O}(10^3)$), l'analyse dimensionnelle fait apparaître la traînée comme terme prépondérant régissant le mouvement particulière dans l'éq. 3.7, étant de l'ordre du carré de l'inverse du diamètre. On en déduit l'équation simplifiée :

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (u_{p,i} - u_i) \quad (3.11)$$

où τ_p est le temps de relaxation de la particule définit comme :

$$\tau_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p}{\rho} \frac{d_p}{C_d(Re_p) |u_{p,i} - u_i|} \quad (3.12)$$

avec $C_d(Re_p)$ donné par l' eq. 3.10 .

On exprime également la traînée par l'éq 3.13, autre écriture de l'éq. 3.8 :

$$F_{p,i} = \frac{1}{\tau_p}(u_{p,i} - u_i) \quad (3.13)$$

Le comportement d'une particule dans un fluide peut être caractérisé par le rapport du temps caractéristique particulaire τ_p et un temps caractéristique de l'écoulement fluide τ_f , ce qui définit le nombre de Stokes :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (3.14)$$

1.3 Interaction entre la phase porteuse et la phase dispersée

L'interaction entre les particules et la phase porteuse est double. D'abord, le gaz perturbe les particules, mais les particules altèrent à l'inverse la phase gazeuse. Afin d'évaluer précisément les termes de couplage à l'interface entre une particule et le gaz environnant, l'interface entre les deux phases doit être résolue, ce qui induit des coûts de calcul prohibitifs. On peut s'affranchir d'un tel problème en faisant l'approximation du point source de [Saffmann \(1973\)](#). En effet, cette méthode permet l'expression des termes d'échanges par des termes sources ponctuels coïncidant avec la position de la particule.

1.3. 1) Approximation du point source

On considère N particules, sphériques et rigides, en déplacement dans un liquide visqueux. On fait l'hypothèse d'un fluide au repos, afin de simplifier les équations. La concentration volumique en particules est faible et la densité du fluide est constante. Sous ces conditions, les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement du gaz sont :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.15)$$

$$\mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} - \frac{\partial p}{\partial x_i} = -F_{p,i}^n \quad (3.16)$$

où $F_{p,i}^n$ est la force exercée sur la particule n . Le couplage entre les deux phases est assuré par une condition de non glissement à la surface de la particule.

$$u_i = u_{p,i}^n \quad \text{for} \quad x \in S_p^n \quad \text{for} \quad n = 1, N \quad (3.17)$$

avec S_p^n la surface de la particule n . La force s'exerçant sur la particule est :

$$F_{p,i}^n = \int_{S_p^n} (-p\delta_{ij} + \tau_{ij})n_j dS \quad (3.18)$$

Par application de la troisième loi de Newton, la force s'exerçant sur le fluide est :

$$-F_{p,i}^n = \int_{S_p} (p\delta_{ij} - \tau_{ij})n_j dS \quad (3.19)$$

Cependant, l'écriture de la force de couplage entre les phases nécessite une connaissance de l'écoulement à la surface de la particule. L'approche du point source de [Saffmann \(1973\)](#) est intéressante car elle impose une distribution de forces centrées en chaque particule qui permet de vérifier grossièrement la condition aux limites définie au préalable dans l'éq. 3.17 ([Maxey and Patel \(2001\)](#)). Ces forces s'écrivent sous la forme d'une expansion multipolaire :

$$\mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} - \frac{\partial p}{\partial x_i} = \sum_{n=1}^{N_p} \left[F_i^n \delta(x_i - x_{p,i}) + F_{ij}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(x_i - x_{p,i}) + F_{ijk}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \delta(x_i - x_{p,i}) \right] \quad (3.20)$$

Les coefficients F_i^n , F_{ij}^n et F_{ijk}^n sont respectivement la force polaire, dipolaire, et quadripolaire. Grâce à la linéarité des équations simplifiées (écoulement de Stokes), la perturbation du fluide en un point peut être considérée comme une superposition linéaire des écoulements induits par chaque terme multipole. Une écriture tensorielle est donc possible :

$$u_i = T_{ij} F_j \quad (3.21)$$

où T_{ij} définit le tenseur d'Oseen :

$$T_{ij} = \frac{1}{8\pi\mu} \left(\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \right) \quad (3.22)$$

La vitesse induite par une force dipolaire est obtenue à partir de la dérivée simple du tenseur d'Oseen, celle induite par une force quadripolaire par une dérivée double. Les forces agissant sur une particule isolée de diamètre d_p dans un fluide au repos sont la traînée, et une force quadripole dégénérée ([Maxey and Patel \(2001\)](#)) :

$$F_i = F_{p,i} = 3\pi d_p \mu (u_i - u_{p,i}) \quad (3.23)$$

$$F_{ijk} = \frac{d_p^2}{24} F_{p,i} \delta_{jk} \quad (3.24)$$

où δ_{jk} est le symbole de Kronecker. La vitesse du fluide perturbée par une particule isolée dans un écoulement de Stokes devient :

$$u_i = \frac{1}{8\pi\mu} F_{p,j} \left(\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \right) + \frac{d_p^2}{96\pi\mu} F_{p,j} \left(\frac{\delta_{ij}}{r^3} + 3 \frac{r_i r_j}{r^5} \right) \quad (3.25)$$

Pour des particules de faible diamètre comparé aux échelles de l'écoulement, seule la première partie de la première contribution de l'éq. 3.25 est à prendre en compte, et le terme multipolaire peut être réduit au premier terme. Une force ponctuelle (traînée de Stokes) centrée sur la particule représente donc la perturbation de l'écoulement de la particule dans les équations de Stokes :

$$\mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} - \frac{\partial p}{\partial x_i} = -F_{p,i} \delta(x_i - x_{p,i}) \quad (3.26)$$

Ce résultat n'est valide que pour les écoulements de Stokes, bien qu'il soit utilisé pour d'autres écoulements dans la pratique.

1.3. 2) Interaction avec la turbulence

Hinze (1972) apporte des compléments sur l'impact des particules sur la turbulence. En effet, pour un écoulement chargé en particules, le cisaillement local augmente et modifie donc la turbulence. De plus, des tourbillons apparaissent dans les sillages de chacune des particules. Les travaux de Kulick et al. (1994) ont étudié de manière expérimentale un écoulement turbulent chargé en particules dans un canal. Il apparaît que la turbulence est atténuée par la présence de particules. Le même résultat a été confirmé par Sato et al. (1996) dans un jet vertical, observant une plus faible production d'énergie cinétique.

Les DNS de Squires and Eaton (1991a) ont elles aussi confirmé ces résultats. Ils remarquent une migration des gouttes de taille faible vers les zones de faible vortacité/haut cisaillement, appelée concentration préférentielle, dans un écoulement chargé en particules. Elghobashi and Truesdell (1993) retrouvent un résultat similaire en effectuant des simulations numériques directes de Turbulence Homogène Isotrope décroissante chargée en particules et interprètent cette dissipation de l'énergie comme le résultat d'une accumulation de l'énergie du fluide dans les petites échelles. Ce résultat a été étendu par Boivin et al. (1998) : alors que les particules peuvent ajouter de l'énergie dans les petites échelles de l'écoulement, elles sont capables de retirer de l'énergie des grandes structures.

1.4 Evaporation d'une particule isolée

Le modèle d'évaporation utilisé dans cette thèse est un modèle de Spalding (1953) basé sur une loi d'équilibre, implanté par Jaegle (2009) pour le solveur Lagrangien d'AVBP et décrit ci-dessous. Le modèle dérive des équations de conservation de la masse, et d'énergie d'une particule baignant dans un fluide. Les hypothèses suivantes sont faites :

- H1 : La particule est isolée, et les effets sur l'évaporation dues à l'interaction entre les particules ne sont pas pris en compte.

- H2 : L'atmosphère autour de la particule est au repos et le problème est quasi stationnaire, ce qui permet de simplifier les termes temporels dans les équations.
- H3 : La particule est à l'équilibre avec le gaz qui l'entoure.
- H4 : On considère la conductivité thermique à l'intérieur de la particule comme étant infinie, ce qui implique une température uniforme partout à l'intérieur de la sphère.

On se place ici dans le repère sphérique, et seules les composantes radiales sont considérées, au vu des symétries du système. Les équations de conservation sont alors écrites entre la surface de la particule (identifiée par l'indice ξ) et le champ lointain gazeux (identifié par l'indice ∞).

$$\rho u r^2 = \text{constant} = \frac{\dot{m}_v}{4\pi} \quad (3.27)$$

$$\rho u r^2 \frac{dY_v}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 [\rho D_v] \frac{dY_v}{dr} \right) \quad (3.28)$$

$$\rho u r^2 \frac{dh}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\lambda}{c_p} \frac{dh}{dr} \right) \quad (3.29)$$

où l'espèce évaporante est indexée par v . Les coordonnées sphériques impliquent aussi un flux partant de la particule positif.

1.4. 1) Transfert de masse

Si on considère l'évolution de la masse de la particule au cours du temps, d'après [Spalding \(1953\)](#), on a :

$$\dot{m}_p = \pi d_p Sh [\rho D_v] \ln(B_M + 1) \quad (3.30)$$

où B_M est le nombre de masse de Spalding :

$$B_M = \frac{Y_{v,\xi} - Y_{v,\infty}}{1 - Y_{v,\xi}} \quad (3.31)$$

Le nombre de Sherwood Sh représente le rapport entre le transfert de masse par convection et celui par conduction. Il prend la valeur 2 dans une atmosphère au repos. Cependant, cette affirmation est critiquable car l'écoulement proche particule dans les cas d'application n'est pas au repos, et le nombre de Sherwood est alors ajusté à l'aide de corrélations empiriques pour prendre en compte la différence de vitesse entre la particule et le gaz dans cette zone. [Ranz and Marshall \(1952\)](#) (inspiré par [Frössling \(1938\)](#)) proposent l'équation suivante :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc_v^{1/3} \quad (3.32)$$

où Sc_v représente le nombre de Schmitt de l'espèce évaporante. On utilise la loi de Clausius Clapeyron qui suppose un équilibre thermodynamique à la surface de la particule pendant l'évaporation, en accord avec l'hypothèse H3, pour déterminer la fraction massique de vapeur à la surface de la particule :

$$P_{v,\xi} = P_{cc} \exp \left(\frac{W_v L_v(T_{ref})}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\xi} \right) \right) \quad (3.33)$$

où l'indice cc désigne un point de référence de la courbe de saturation. \mathcal{R} est la constante universelle des gaz parfaits et $L_v(T_{ref})$ la chaleur latente de vaporisation à la température de référence T_{ref} . La pression partielle de vapeur $P_{v,\xi}$ donne de manière directe l'expression de la fraction molaire $X_{v,\xi}$ (eq. 3.34) et donc la fraction massique à la surface de la particule $Y_{v,\xi}$ grâce aux eq. 3.35, et 3.36.

$$X_{v,\xi} = \frac{P_{v,\xi}}{P} \quad (3.34)$$

$$Y_{v,\xi} = \frac{X_{v,\xi} W_v}{X_{v,\xi} W_v + (1 - X_{v,\xi}) \bar{W}_{nv,\xi}} \quad (3.35)$$

où W_v est le poids moléculaire de l'espèce évaporante, W le poids moléculaire du mélange, $\bar{W}_{nv,\xi}$ le poids moléculaire du mélange en champ lointain.

$$\bar{W}_{nv,\xi} = \bar{W}_{nv,\infty} = \frac{1 - Y_{v,\infty}}{1 - Y_{v,\infty} \frac{\bar{W}}{W_v}} \bar{W} \quad (3.36)$$

1.4. 2) Transfert de chaleur

L'évolution de la température particulaire est obtenue à partir de l'éq. 3.29. On part de l'équation d'équilibre suivante :

$$\Phi_l^{ev} + \Phi_l^c + \Phi_g^{ev} + \Phi_g^c = 0 \quad (3.37)$$

où Φ^c et Φ^{ev} sont les flux de chaleurs par conduction et convection respectivement.

Les flux convectifs liquides ϕ_l^c et gazeux ϕ_g^c peuvent être exprimés en fonction de l'enthalpie latente de vaporisation :

$$\Phi_l^{ev} + \Phi_l^c = -\dot{m}_v h_{s,p}(T_\xi) + \dot{m}_v h_{s,v}(T_\xi) = \dot{m}_v L_v(T_\xi) \quad (3.38)$$

D'après l'évolution temporelle de l'enthalpie de la particule, on peut écrire :

$$\frac{d}{dt}(m_p h_{s,p}(T_p)) = \Phi_l^c + \Phi_l^{ev} \quad (3.39)$$

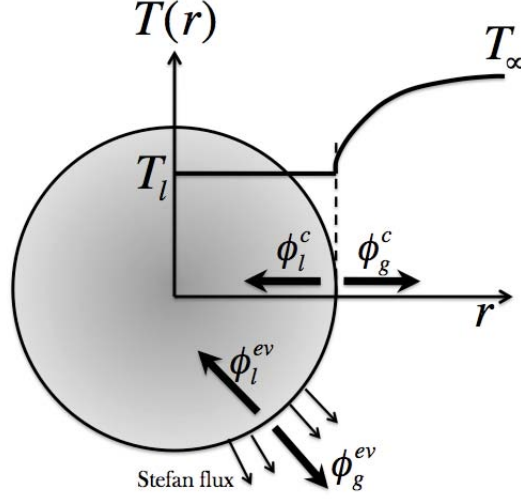


Figure 3.5: Schéma des contributions au flux de chaleur autour d'une goutte

En utilisant la relation $dh_{s,p}(T_p) = C_{p,l}dT_p$ avec l'éq. 3.39 et le fait que $\phi_l^c = -\phi_g^c$, on obtient une expression pour la dérivée temporelle de la température de la particule :

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p C_{p,l}} (-\Phi_g^c + \dot{m}_v L_v(T_\xi)) \quad (3.40)$$

Le dernier terme à déterminer est le flux conductif du côté gazeux. On peut trouver une expression du gradient de température du côté gazeux à la surface de la particule en intégrant deux fois l'équation de conservation de l'enthalpie (eq. 3.29) entre la surface de la particule et l'infini :

$$\Phi_g^c = \pi \lambda d_p Nu (T_\xi - T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T} \quad (3.41)$$

Le nombre de Nusselt Nu représente le rapport entre les transferts de chaleur convectif et conductif, et de manière analogue au nombre de Sherwood, prend la valeur 2 dans une atmosphère gazeuse au repos. Une modification est également apportée à son expression pour prendre en compte la différence de vitesse en proche particule :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr_v^{1/3} \quad (3.42)$$

où Pr_v est le nombre de Prandtl de l'espèce évaporante. B_T est le nombre de Spalding pour la température :

$$B_T = \frac{(T_\infty - T_\xi) \dot{m}_v C_p}{T_\xi - T_\infty} \quad (3.43)$$

On peut aussi trouver une relation entre le nombre de masse de Spalding B_M et celui de température B_T :

$$B_T = (1 + B_M) \frac{Sh}{Nu Le_v} - 1 \quad (3.44)$$

avec Le_v le nombre de Lewis de l'espèce évaporante.

Intégrer les éqs. 3.28 et 3.29 de la surface de la particule au champ lointain requiert la connaissance de quantités thermodynamiques moyennes sur le domaine d'intégration, comme la viscosité dynamique $\bar{\mu}$ et la capacité calorifique \bar{C}_p du mélange gazeux. Ces quantités moyennes sont évaluées en interpolant la température et les fractions massiques avec la loi du "1/3 – 2/3" (Hubbard et al. (1975)) :

$$T_i = \frac{2}{3}T_\xi + \frac{1}{3}T_\infty \quad (3.45)$$

$$Y_{v,i} = \frac{2}{3}Y_{v,\xi} + \frac{1}{3}(Y_{v,\infty}) \quad (3.46)$$

1.4. 3) Modèle amélioré (Sierra (2012))

Un nouveau modèle a été proposé par Sierra (2012) dans le cadre de sa thèse afin de s'approcher de la théorie cinétique des gaz de Chapman-Enskog. Initialement, Sanjosé (2009) avait évalué l'impact du transport complexe et des propriétés thermodynamiques sur l'évaporation. Ces simulations utilisaient des propriétés de transports et thermodynamiques plus complexes. Les résultats montraient que l'évaporation est très influencée par l'utilisation des ces propriétés thermodynamique et de transport complexe, mais restent très coûteuses en termes de temps CPU. Sierra (2012) propose alors deux améliorations :

- Les nombres de Prandtl Pr et de Schmidt Sc à la surface de la goutte ne sont plus ceux associés à l'espèce gazeuse et fixés par la chimie. Désormais, un calcul est réalisé avec le code CANTERA (D.G.Goodwin (2002)) pour évaluer Pr_{evap} et Sc_{evap} propres au mélange à la surface de la goutte.
- La viscosité du mélange est évaluée par la relation de Wilke (Bird et al. (1960)), utilisée dans le calcul a posteriori de CANTERA. La viscosité μ_k de chaque espèce utilise une loi puissance (eq. 3.49) :

$$\mu = \sum_k \frac{X_k \mu_k}{\sum_j X_j \phi_{kj}} \quad (3.47)$$

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_i}{W_j}\right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{W_i}{W_j}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2 \quad (3.48)$$

$$\mu_k = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)_k^b \quad (3.49)$$

Les modèles d'évaporation sont évalués par comparaison avec des expériences de goutte isolée. Récemment, Chauveau et al. (2008) ont obtenu de nouveaux résultats en modifiant la forme des

fibres porteuses de goutte isolée dans des expériences d'évaporation : ils utilisent un réseau croisé de fibres plus fines pour supporter la goutte, ce qui réduit l'effet de la conduction de chaleur et permet de garder une goutte sphérique. Ces résultats donnent des temps d'évaporation bien plus importants que ceux de [Nomura et al. \(1996\)](#), qui utilisent une seule fibre plus conséquente.

La comparaison des modèles présentés précédemment avec ces différentes expériences est présentée en Fig 3.6. Le modèle *Complex* présente le résultat obtenu en utilisant le transport complexe. Le modèle initial qui prenait les nombres de Prandtl et Schmidt égaux à ceux du mélange gazeux est dénommé *Spalding*. Le nouveau modèle correspond à *Spalding improved*. L'ancien modèle *Spalding* donne des résultats très proches de ceux de [Nomura et al. \(1996\)](#), alors que le modèle *Complex* et le modèle amélioré *Spalding improved* donne des résultats bien plus proches de ceux de [Chauveau et al. \(2008\)](#). En termes de coût calcul, le modèle utilisant le transport complexe est bien plus coûteux, mais peu de différences apparaissent entre l'ancien et le nouveau modèle.

Dans ce travail, tous les calculs évaporants seront effectués avec le modèle amélioré de [Sierra \(2012\)](#). On note cependant que le choix des nombres de Prandtl Pr_{evap} et de Schmidt Sc_{evap} peut s'avérer délicat car il nécessite de caractériser le champ fluide à l'infini. Si celui-ci est bien défini dans le cas d'une goutte isolée évaporante, il est difficile à caractériser dans des flammes diphasiques. Dans une flamme diphasique de chambre de combustion aéronautique, la flamme se situe proche de l'injection de carburant liquide. Par conséquent, les effets du modèle d'évaporation sont réduits comparé à la combustion. Dans ce cas, [Sierra \(2012\)](#) propose d'utiliser les caractéristiques des gaz frais comme conditions à l'infini pour fixer Pr_{evap} et Sc_{evap} . Cette méthodologie a été employée dans la chambre multi-point SNECMA présentée en Annexe 6 et sera également utilisée dans la chambre Mercato (chapitre 6). Des mesures simultanées de champs de kérosène gazeux et de gouttes dans des flammes diphasiques seraient nécessaires pour valider ce choix.

2 Le formalisme Eulérien mésoscopique

Dans l'approche Eulérienne, la description de l'histoire de chaque particule est remplacée par la description des propriétés statistiques moyennes de l'ensemble des particules se trouvant au point x et à l'instant t . Cela revient à considérer le spray comme un milieu continu, au même titre que le gaz est une description continue de l'ensemble des molécules qui le constituent. La procédure de moyenne appliquée aux particules peut être considérée soit d'un point de vue statistique soit d'un point de vue volumique ([Zhang and Prosperetti \(1994\)](#); [Jackson \(1997\)](#); [Druzhinin and Elghobashi \(1998\)](#); [Sirignano \(1999\)](#)), ce qui mène à deux formulations distinctes pour la phase dispersée, bien que similaires ([Kaufmann \(2004\)](#)). On s'intéresse ici au formalisme Eulérien mésoscopique de [Février et al. \(2005\)](#).

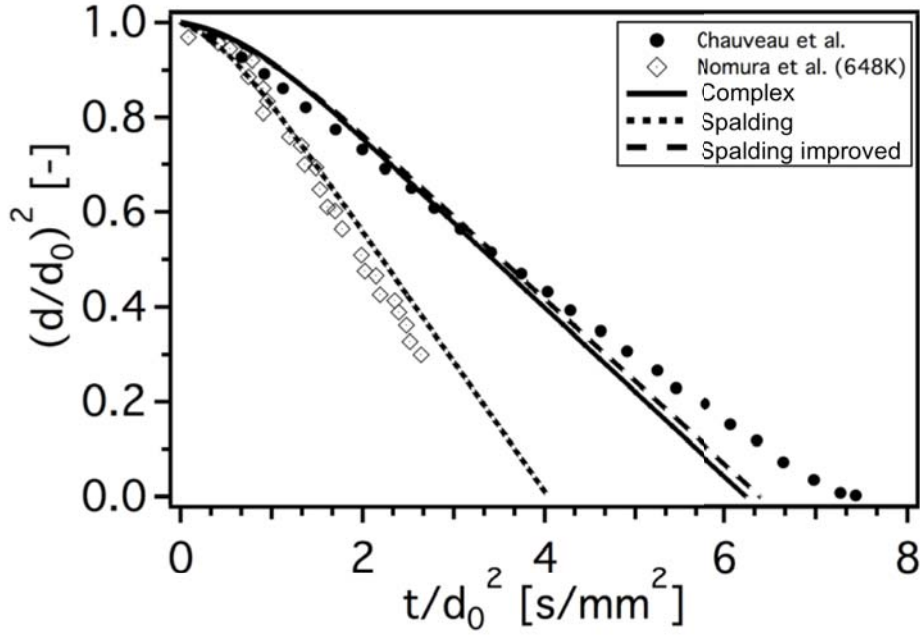


Figure 3.6: Evolution temporelle de surface de goutte adimensionnée de C_7H_{16} à $T_g = 423K$, $P_g = 1bar$ (Sierra (2012))

2.1 De l'équation de Boltzmann vers celle d'Enskog

On considère une particule quelconque, dont la vitesse u_p , la température T_p , la masse m_p et la position x à l'instant t peuvent prendre les valeurs respectives c_p , ξ_p , μ_p et x_p dans l'espace des phases, c'est-à-dire l'espace des possibles. On définit la fonction $\mathcal{P}_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x_p, t)$ de l'espace des phases qui décrit la probabilité pour que (u_p, T_p, m_p, x) prennent les valeurs (c_p, ξ_p, μ_p, x_p) :

$$\mathcal{P}_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x_p, t) = \delta(c_p - u_p(t))\delta(\xi_p - T_p(t))\delta(\mu_p - m_p(t))\delta(x_p - X(t)) \quad (3.50)$$

avec δ la fonction de Dirac. On définit la réalisation \mathcal{H}_p du spray comme l'ensemble des fonctions \mathcal{P}_p décrivant le mouvement des N_p particules qui constituent le spray. En prenant la moyenne d'ensemble des réalisations \mathcal{H}_p conditionnée par une réalisation de la phase porteuse \mathcal{H}_f , on définit la fonction de probabilité f_p (FDP) :

$$f_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x_p, t, \mathcal{H}_f) = \langle \mathcal{P}_p(c_p, \xi_p, \mu_p, X, t) | \mathcal{H}_f \rangle \quad (3.51)$$

où la moyenne statistique $\langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle$ s'obtient sur un grand nombre de réalisations \mathcal{H}_p des particules pour une seule réalisation \mathcal{H}_f de la phase gazeuse. La fonction de densité de probabilité Eulérienne

vérifie une équation du type Boltzmann pour un ensemble de variables d'état choisi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_p + \frac{\partial}{\partial X_i} c_{p,i} f_p + \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left\langle \frac{\partial u_{p,i}}{\partial t} | c_p, \xi_p, \mu_p \right\rangle f_p + \frac{\partial}{\partial \mu_p} \left\langle \frac{\partial m_p}{\partial t} | c_p, \xi_p, \mu_p \right\rangle f_p + \\ \frac{\partial}{\partial \xi_p} \left\langle \frac{\partial T_p}{\partial t} | c_p, \xi_p, \mu_p \right\rangle f_p = \left(\frac{\partial}{\partial t} f_p \right)_{coll} \end{aligned} \quad (3.52)$$

où $\left(\frac{\partial}{\partial t} f_p \right)_{coll}$ représente la variation temporelle de la FDP due aux interactions inter particulaires. Elle est négligée dans cette thèse, l'hypothèse d'écoulements dilués étant faite.

L'utilisation d'une moyenne de phase pondérée par la masse est également intéressante pour la phase dispersée, par analogie avec la moyenne de Favre pour la phase gazeuse :

$$\psi = \langle \psi \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \psi(c_p, \xi_p, \mu_p) f_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x, t, \mathcal{H}_f) dc_p d\xi_p d\mu_p \quad (3.53)$$

où ρ_l est la masse volumique du liquide et $\check{\alpha}_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée définie par :

$$\rho_l \check{\alpha}_l = \int \mu_p f_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x, t, \mathcal{H}_f) dc_p d\xi_p d\mu_p \quad (3.54)$$

Pour une particule sphérique de diamètre d_p on a la relation suivante :

$$\check{\alpha}_l = \frac{\pi}{6} \check{n}_l d_p^3 \quad (3.55)$$

où \check{n}_l est la densité volumique de gouttes définie ainsi :

$$\check{n}_l = \int f_p(c_p, \xi_p, \mu_p, x, t, \mathcal{H}_f) dc_p d\xi_p d\mu_p \quad (3.56)$$

Grandeurs mésoscopiques et décorréées En remplaçant ψ par la vitesse u_p dans l'éq. 3.53, on obtient la vitesse moyenne locale du spray liquide conditionnée par la réalisation \mathcal{H}_f de la phase porteuse :

$$\check{u}_l(x, t | \mathcal{H}_f) = \langle u_p \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p c_p f_p dc_p d\xi_p d\mu_p \quad (3.57)$$

\check{u}_l est appelé vitesse mésoscopique ou vitesse corrélée. De ce fait, pour une particule n donnée, on peut écrire sa vitesse u_p^n comme étant la somme de la composante mésoscopique et d'une composante restante $u_p^{''n}$ propre à chaque particule n appelée vitesse décorréée telle que :

$$u_p = \check{u}_l + u_p^{''n} \quad \text{avec} \quad \langle u_p^{''n} \rangle_l = 0 \quad (3.58)$$

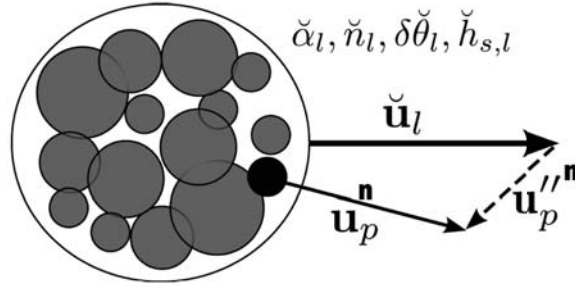


Figure 3.7: Interprétation schématique des grandeurs mésoscopique et décorrélée

Une représentation schématique de cette décomposition est donnée en Fig 3.7 :

Dans un spray, un groupe de particules partage donc un même mouvement mésoscopique $\check{\mathbf{u}}_l$ même si chaque particule possède son mouvement propre. La modélisation du mouvement décorrélé nécessite l'introduction des quantités supplémentaires. Parmi ces quantités, on peut noter le tenseur des vitesses décorrélées $\delta\check{R}_l$:

$$\delta\check{R}_{l,ij}(x_i, t|\mathcal{H}_f) = \langle u_{p,i}'' u_{p,j}'' \rangle_l \quad (3.59)$$

et l'énergie décorrélée $\delta\check{\theta}_l$:

$$\delta\check{\theta}_l = \frac{1}{2} \langle u_{p,i}'' u_{p,i}'' \rangle_l \quad (3.60)$$

La quantité $\delta\check{\theta}_l$ est la demie-trace du tenseur des vitesses décorrélées.

On introduit aussi le tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\check{S}_l$:

$$\delta\check{S}_{l,ijk}(x, t|\mathcal{H}_f) = \langle u_{p,i}'' u_{p,j}'' u_{p,k}'' \rangle_l \quad (3.61)$$

Equation générale d'Enskog En multipliant l'éq. 3.52 par une fonction particulière ψ et en intégrant sur l'espace des phases, on obtient l'équation d'évolution de ψ , appelée équation d'Enskog :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \langle \psi \rangle_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u_{l,i} \psi \rangle_l &= + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial u_{p,i}}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,i}} \right\rangle_l + \\ &\rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial T_p}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial m_p}{\partial t} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_l \end{aligned} \quad (3.62)$$

En introduisant par ailleurs la décomposition de la vitesse en deux contributions (éq. 3.58), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{\psi} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{\psi} &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u_{l,i}'' \psi \rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial u_{p,i}}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,i}} \right\rangle_l + \\ &\rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial T_p}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial m_p}{\partial t} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_l. \end{aligned} \quad (3.63)$$

On définit aussi :

$$\mathbf{T}(\psi) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u''_{l,i} \psi \rangle_l \quad (3.64)$$

2.2 Equations de conservation

L'ensemble des équations Eulériennes de conservation qui caractérisent le spray peuvent être écrites à partir de l'équation d'Enskog (eq. 3.63). Pour simplifier la dérivation, on fera les hypothèses suivantes :

- H1 : toutes les particules qui sont localisées au point x et à l'instant t ont le même diamètre : le spray est monodisperse.
- H2 : toutes les particules localisées ont la même température uniforme.
- H3 : les particules sont sphériques.
- H4 : Le rapport des masses volumiques entre la phase dispersée et la phase porteuse est petit : $\rho_p / \rho_g \sim \mathcal{O}(10^3)$.
- H5 : La fraction volumique liquide reste suffisamment faible pour que l'interaction entre particules reste négligeable, et que la phase porteuse reste peu perturbée par la présence de la phase dispersée. Cette hypothèse permet d'utiliser une moyenne statistique conditionnée par une seule réalisation de la phase porteuse (eq. 3.51). Cette hypothèse est mise à mal dans les cas évaporants ou fortement chargés, mais les conséquences sont encore mal comprises et une telle étude dépasse le cadre de cette thèse.

L'hypothèse H4 permet de négliger toutes les forces qui s'exercent sur une particule, excepté la traînée. L'hypothèse H1 est une hypothèse forte qui est facilement relaxée en Lagrangien.

Conservation de la densité en nombre de particules L'équation de l'évolution de la densité volumique de gouttes est obtenue en prenant $\psi = 1/m_p$ dans l'eq. 3.63 :

$$\frac{\partial \check{n}_l}{\partial t} + \frac{\partial \check{n}_l \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = \mathbf{T}\left(\frac{1}{m_p}\right) \quad (3.65)$$

Comme le spray est localement monodisperse, toutes les particules ont la même masse et $\mathbf{T}\left(\frac{1}{m_p}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u''_{p,i} \frac{1}{m_p} \rangle_l = 0$.

Conservation de la fraction volumique L'équation de l'évolution de la fraction volumique liquide est obtenue en prenant $\psi = 1$ dans l'éq. 3.63 :

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = \mathbf{T}(1) + \Gamma_l \quad (3.66)$$

$\mathbf{T}(1)$ disparaît grâce à l'éq. 3.58. $\Gamma_l = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle$ dénote l'échange de masse avec la phase gazeuse due à l'évaporation.

Conservation de la quantité de mouvement L'évolution de la quantité de mouvement liquide est obtenue en prenant $\psi = u_p$ dans l'éq. 3.63 :

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = \mathbf{T}(u''_{p,i}) + \mathbf{C}(u''_{p,i}) + \Gamma_{u,i} + F_{d,i} \quad (3.67)$$

$\mathbf{T}(u''_{p,i})$ représente le transport de quantité de mouvement par le mouvement décorrélé et vaut $\mathbf{T}(u''_{p,i}) = -\frac{\partial}{\partial x_k} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij}$. $F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l$ définit l'échange de quantité de mouvement inter phase via la force de traînée $F_{p,i}$ qui s'exerce sur chaque particule. $\Gamma_{u,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{u_{p,i}}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l$ représente les échanges de quantité de mouvement dûs à l'évaporation. Les gouttes étant à la même température et ayant la même masse, on a : $\Gamma_{u,i} = \Gamma \check{u}_{l,i}$.

Conservation de l'énergie décorrélée L'évolution de la quantité d'énergie décorrélée est obtenue en prenant $\psi = \frac{1}{2} \langle u''_{p,i} u''_{p,i} \rangle = \delta \check{\theta}_l$ dans l'éq. 3.63 :

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\theta}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \delta \check{\theta}_l}{\partial x_j} = \mathbf{T}\left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i}\right) + \mathbf{U}_\theta + \mathbf{W}_\theta + \Gamma_\theta \quad (3.68)$$

$\mathbf{T}\left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i}\right)$ représente le transport de l'énergie décorrélé par le mouvement corrélé et vaut $\mathbf{T}\left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ijm}$. $\mathbf{W}_\theta = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle u''_{p,i} \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l$ représente la variation d'énergie décorrélée via la force de traînée. $\Gamma_\theta = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{2} \frac{u''_{p,i} u''_{p,i}}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l$ représente la variation d'énergie décorrélée due au phénomène d'évaporation, simplifiée en $\Gamma_\theta = \Gamma \delta \check{\theta}_l$ pour un spray mono diamètre et mono température. Enfin, $\mathbf{U}_\theta = -\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\mathcal{R}}_{l,ij} \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j}$ provient de termes additionnels et inclut les effets du moment corrélé sur l'énergie décorrélée.

Conservation de l'enthalpie liquide Finalement, l'évolution de l'enthalpie liquide est obtenue en prenant $\psi = h_{s,p}$ dans l'éq. 3.63 :

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{h}_{s,l}}{\partial x_j} = \Pi_l + \mathbf{T}(h''_{s,p}) \quad (3.69)$$

$T(h''_{s,p})$ représente le transport d'enthalpie liquide via le mouvement décorrélé, qui est négligé dans cette thèse. Π_l est la variation de l'enthalpie sensible due de l'évaporation. Ces développements mènent finalement à l'ensemble d'équations décrivant la phase dispersée en DNS :

$$\frac{\partial \check{n}_l}{\partial t} + \frac{\partial \check{n}_l \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (3.70)$$

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = \Gamma_l \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} = T(u''_{p,i}) + \Gamma_{u,i} + F_{d,i} \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l}}{\partial t} + \frac{\partial \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l}}{\partial x_j} = \Pi_l \quad (3.73)$$

évolution	mouvement	mouvement	termes
temporelle	mésoscopique	décorrélé	sources

Les termes sources de traînée et évaporation sont fixés de la même façon en Eulérien et en Lagrangien.

2.3 Fermeture des termes décorrélés

Dans AVBP, pour le tenseur de second ordre $\delta \check{R}_{l,ij}$ un modèle de Boussinesq (Simonin (2002)) est utilisé (éq. 3.74) et pour le tenseur de troisième ordre $\delta \check{S}_{l,ijk}$, un modèle de diffusion (Simonin, 1996; Kaufmann et al., 2008b) est introduit en éq. 3.75.

$$\delta \check{R}_{l,ij}^* = -\nu_{RUM} \left(\frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \check{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad \text{avec :} \quad \nu_{RUM} = \frac{1}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.74)$$

$$\delta \check{S}_{l,ijm} = -\kappa_{RUM} \frac{\partial \delta \check{\theta}_p}{\partial x_m} \quad \text{avec :} \quad \kappa_{RUM} = \frac{10}{27} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.75)$$

Ce modèle (appelé modèle *VISCO*) a donné des résultats corrects en comparaison avec une approche Lagrangienne dans les simulations de THI chargée en particules (Kaufmann (2004); Riber (2007); Kaufmann and Moreau (2008); Vie (2010)), mais les travaux de Riber (2007) ont montré les difficultés du modèle à reproduire correctement la dynamique des particules dans les écoulements cisailés (Hishida et al. (1987)). Des travaux plus récents réalisés par Masi (2010) ont permis de proposer de nouveaux modèles algébriques pour modéliser le tenseur du second ordre $\delta \check{R}_{p,ij}^*$ en réalisant des calculs a priori Lagrangiens de nappes chargées en particules. Le modèle *AXISY* est le plus proche du modèle *VISCO* : c'est également un modèle linéaire (en gradient de vitesse

mésoscopique), mais l'échelle de temps caractéristique est liée au tenseur des déformations mésoscopique de la phase liquide, contrairement à *VISCO* qui utilise le temps de relaxation des particules comme échelle de temps caractéristique. Si le modèle *AXISY* améliore les prédictions du modèle dans la nappe chargée en particules, son comportement n'est pas constant selon le nombre de Stokes des particules et le nombre de Reynolds de l'écoulement fluide. Plusieurs modèles non linéaires ont donc été proposés par Masi (2010). Le plus satisfaisant $2\Phi EASM3$ est basé sur la même échelle de temps que *AXISY*. Les comparaisons a priori avec les résultats Lagrangiens dans la nappe chargée en particules montrent un bon accord pour une large gamme de nombres de Reynolds et de nombre de Stokes. Sierra (2012) a confirmé l'intérêt du modèle dans des calculs a posteriori avec l'approche Euler-Euler mésoscopique dans les calculs de nappe chargée en particules avec AVBP. Un exemple de comparaison entre les différents modèles proposés par Masi (2010) et testés dans AVBP est donné en Fig. 3.8. Dans ce cas, le modèle *VISCO* ne permet pas de mener le calcul à son terme, le calcul étant trop instable. On remarque par ailleurs que le modèle *NORUM* qui consiste à négliger les termes décorrélés est en bon accord avec les résultats lagrangiens et le modèle $2\Phi EASM3$. Son comportement n'est cependant pas constant en fonction du nombre de Stokes, notamment lorsque l'inertie des particules devient grande.

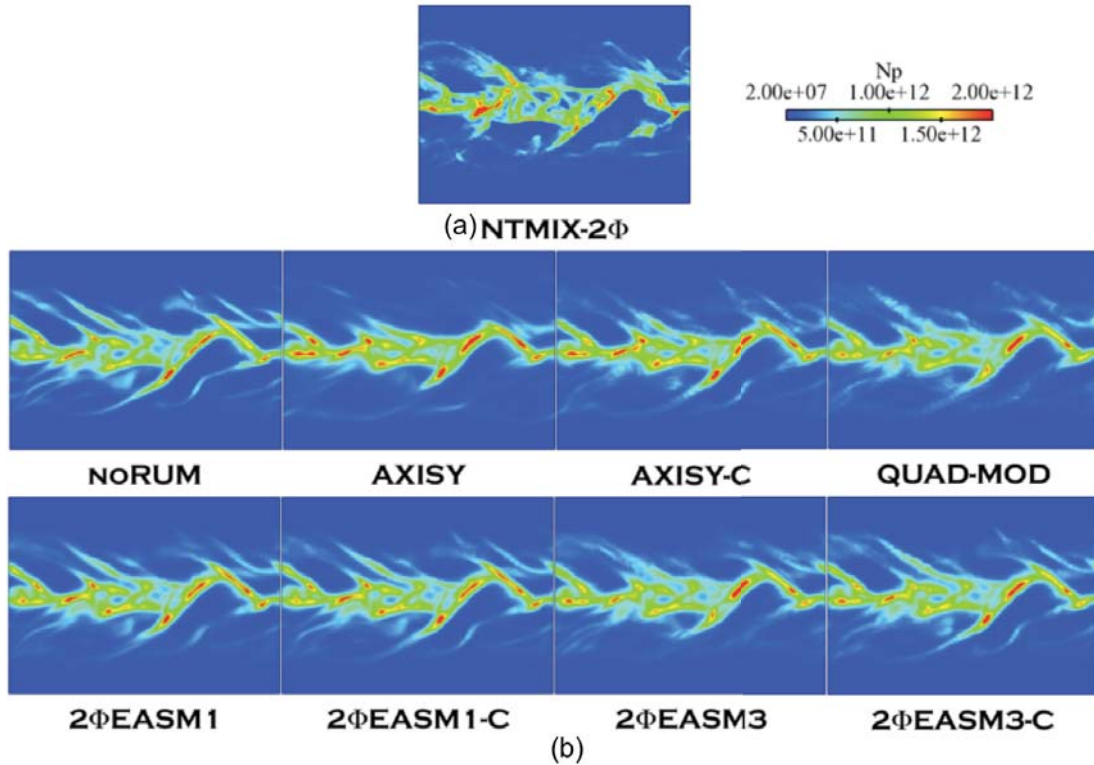


Figure 3.8: Comparaison des deux formalismes : (a) Euler/Lagrange projeté sur une grille Eulérienne (b) Euler/Euler mésoscopique pour différents modèles d'énergie décorrélée (Sierra, 2012)

Le modèle $2\Phi EASM3$ ayant été développé, implanté dans AVBP et validé alors que ce travail de thèse était déjà bien avancé, les termes liés au mouvement décorrélé ont été négligés dans ce travail pour les simulations mésoscopiques Eulériennes. Cette approche a déjà été utilisée à plusieurs reprises dans des configurations complexes (Riber et al., 2009; Boileau et al., 2008) et a montré des résultats prometteurs malgré les simplifications réalisées.

2.4 Modèle de sous maille pour la phase dispersée

De façon analogue à la phase gazeuse, les équations de la phase dispersée sont filtrées, ce qui fait apparaître des termes de sous maille. Moreau et al. (2005) propose un modèle visqueux de l'éq. 3.77 pour le tenseur de vitesses de sous maille de l'éq. 3.76. La partie déviatorique est évaluée en utilisant le modèle de Smagorinsky (1963) en eq. 3.79, la partie diagonale avec le modèle de Yoshizawa (1986) en eq. 3.80.

$$\tilde{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \tilde{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}) \quad (3.76)$$

$$\text{modélisé par } \tilde{\tau}_{l,ij}^t = 2\rho_l \tilde{\alpha}_l \nu_{l,t} (\hat{S}_{l,ij} - \frac{1}{3} \hat{S}_{l,kk} \delta_{ij}) + 2\rho_l \tilde{\alpha}_l \kappa_{l,t} \hat{S}_{l,ij} \delta_{ij} \quad (3.77)$$

$$\text{avec } \hat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \hat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.78)$$

$$\text{Smagorinsky: } \nu_{l,t} = (C_{S,l} \Delta)^2 \sqrt{2 \hat{S}_{l,ij} \hat{S}_{l,ij}} \quad (3.79)$$

$$\text{Yoshizawa: } \kappa_{l,t} = 2(C_{V,l} \Delta)^2 \hat{S}_{l,ij} \quad (3.80)$$

Le modèle a déjà été utilisé dans des calculs de bluff-body chargés en particules (Riber et al. (2009)), et dans la chambre MERCATO à froid (Sanjosé (2009)). Il sera utilisé dans toutes les LES Eulériennes de ce travail.

2.5 Modèle de flamme épaissie diphasique de Boileau (2007)

Dans les applications traitées, le spray est présent dans les zones réactives et le taux d'évaporation du carburant liquide conditionne le taux de réaction. Boileau (2007) étudie l'impact de l'épaississement dans des flammes monodimensionnelles diphasiques. Il définit le nombre de Damköhler d'évaporation Da_e , défini par le rapport du temps d'évaporation et du temps caractéristique de la chimie $Da_e = \tau_e / \tau_c$, et propose de le garder constant afin de conserver la structure et la dynamique de flamme intactes. Pour ce faire, il divise les taux de transferts de

masse (éq. 3.81) et de chaleur (éq. 3.82) par le facteur d'épaississement \mathcal{F} , uniquement dans les zones réactives.

$$\Gamma_l \rightarrow \frac{\Gamma_l}{\mathcal{F}} \quad (3.81)$$

$$\Pi_l \rightarrow \frac{\Pi_l}{\mathcal{F}} \quad (3.82)$$

En toute rigueur, il faut également conserver le nombre de Stokes de la flamme St_c , défini par le rapport entre un temps de relaxation des gouttes et un temps chimique $St_c = \tau_p/\tau_c$, en divisant les termes de traînée dans les zones réactives par le facteur d'épaississement \mathcal{F} . Ces corrections ont été appliquées à l'étude de flammes laminaires monodimensionnelles et de flammes turbulentes. Pour ces dernières il est proposé de corriger uniquement la composante de la traînée qui est normale au front de flamme, en utilisant le gradient de température par exemple. Il est ainsi montré que l'épaississement appliqué à la fois à l'évaporation et à la traînée permet de reproduire parfaitement la flamme monodimensionnelle. Cependant la conclusion est moins claire pour la flamme turbulente où la correction de traînée modifie beaucoup la dynamique des gouttes.

En outre, le modèle de flamme épaissie pour la flamme gazeuse prend en compte l'effet de la turbulence en introduisant un plissement de sous-maille, pour prendre en compte l'augmentation de la surface de flamme par les structures non résolues. En négligeant les effets de courbure et d'étirement, une relation linéaire lie le taux de réaction et la surface de flamme. Dans le cas de combustion diphasique, le taux de réaction dépend de la vitesse de la réaction chimique, mais aussi du taux d'évaporation, ce qui conduit à une relation non linéaire. Par manque d'information, [Boileau \(2007\)](#) propose donc de ne pas modéliser l'effet du plissement de sous-maille sur l'évaporation.

Par conséquent, pour les calculs réactifs Eulériens de cette thèse, la correction par le coefficient d'épaississement a été appliquée uniquement sur l'évaporation, comme cela a été fait dans des études précédentes ([Sanjosé \(2009\)](#)). Pour les simulations Lagrangiennes, aucune modification des termes sources n'est effectuée, selon la préconisation de [Senoner \(2010\)](#). Cette question de la correction par le facteur d'épaississement des termes d'échanges entre phases est donc encore ouverte et des travaux sont en cours à ce sujet ([Paulhiac \(2014\)](#)). La différence de traitement de l'évaporation en flamme épaissie sera à garder à l'esprit lors des comparaisons des calculs Lagrangiens et Eulériens du Chapitre 6.

Chapitre 4

Modélisation de l'injection des atomiseurs swirlés

Sommaire

1	FIM-UR : un modèle d'injection pour les atomiseurs swirlés	92
1.1	<i>Présentation du modèle FIM-UR.</i>	92
1.2	<i>Modèle Lagrangien</i>	94
1.3	<i>Modèle Eulérien</i>	95
2	Améliorations du modèle FIM-UR de Sanjosé (2009)	103
2.1	<i>Evaluation du débit liquide</i>	104
2.2	<i>Calcul de l'entraînement d'air</i>	105
2.3	<i>Profils en entrée</i>	106
3	Présentation de la configuration de validation.	109
3.1	<i>Configuration de Yang et al. (2003)</i>	109
3.2	<i>Point de fonctionnement.</i>	109
3.3	<i>Géométries calculées, maillages et conditions aux limites</i>	111
3.4	<i>Conditions aux limites</i>	111
3.5	<i>Caractéristiques des simulations réalisées</i>	113
4	Résultats	114
4.1	<i>Simulations Lagrangiennes</i>	114
4.2	<i>Simulations Eulériennes.</i>	129
5	Conclusion.	133

Pour simuler avec précision l'injection, il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes d'atomisations primaire et secondaire. Dans cette optique, les méthodes de suivi d'interface, type level-set (Sussman et al. (1994); Sethian and Smereka (2003); Olsson and Kreiss (2005)), Volume of Fluid (Gueyffier et al. (1999); Fuster et al. (2009)) ou encore Ghost-Fluid (Fedkiw et al. (1999); Desjardins et al. (2008)) sont les plus répandues. Quand le rapport de densité entre liquide et gaz reste faible ($\frac{\rho_l}{\rho_g} \cong 10$), l'utilisation de ces méthodes est prometteuse (Menard et al. (2007)). Mais quand ce rapport devient typique des applications (≈ 1000), les gradients deviennent très importants et nécessitent des schémas numériques précis. Le problème est actuellement au centre de nombreuses études, dans les groupes de recherche français (V. Moureau CORIA, J.L Estivalezes et P. Berthoumieu ONERA) et européens (R. Koch KIT-ITS). Le projet européen *FIRST* (pour **F**uel **I**njector **R**esearch for **S**ustainable **T**ransport, <http://www.first-fp7project.eu/>) est en grande partie dédié au développement de méthodes numériques et aux expériences permettant de valider les méthodes et comprendre les phénomènes physiques. De plus, des méthodes de couplage entre le suivi d'interface et un solveur Lagrangien sont en développement (Zuzio et al. (2011)).

Dans le cadre de simulations LES dans des chambres aéronautiques, l'utilisation de telles méthodes de suivi d'interface n'est pas encore possible pour des raisons numériques et de modélisation. Martinez (2009) (pour des cônes pleins) puis Sanjosé et al. (2011) (pour des cônes creux) ont donc proposé une méthode permettant d'imposer des profils de vitesses liquide et gazeuse et de granulométrie en sortie d'injecteur, à partir des profils de ces mêmes grandeurs plus en aval de l'injecteur, sans avoir à modéliser les atomisations primaire et secondaire. Le modèle FIM-UR (pour **F**uel **I**njection **M**odel by **U**pstream **R**econstruction) nécessite en entrée les caractéristiques géométriques de l'injecteur swirlé et de l'écoulement liquide. Une première validation a été réalisée par Sanjosé et al. (2011) dans la configuration MERCATO avec les formalismes Eulérien et Lagrangien. Des profils de vitesses liquides et gazeuses issus de simulations Eulériennes et Lagrangiennes ont été comparées à des mesures expérimentales. Les résultats ont montré un accord raisonnable avec les expériences. Cette validation dans une configuration turbulente semble cependant insuffisante dans la mesure où elle ne permet pas de découpler l'impact du modèle FIM-UR de l'écoulement turbulent en proche injection.

L'objectif de ce chapitre est d'évaluer le modèle FIM-UR dans un écoulement laminaire. Les mesures nécessaires à cette validation sont rares dans la littérature. L'étude proposée par Yang et al. (2003), qui compare l'écoulement généré par plusieurs types d'injecteurs à plusieurs points de fonctionnement, semble adaptée. Des profils de vitesses axiales liquides et de tailles de goutte sont donnés pour différentes valeurs de débits et différents types d'injecteurs, des injecteurs plats, et d'autres courbes. Il ressort de ces mesures que les injecteurs courbes ont un meilleur swirl, et génèrent des gouttes plus petites que celles des injecteurs plats. La configuration de Yang et al. (2003) a donc été choisie dans ce travail pour évaluer le modèle FIM-UR dans une configuration laminaire, et l'injecteur le plus proche de celui utilisé dans la section 6 a été retenu.

Ce chapitre se décompose en 4 parties :

- Rappel du modèle FIM-UR pour les formalismes Eulérien et Lagrangien

-
- Description des améliorations apportées à ce modèle, pour l'approche Eulérienne
 - Description de la configuration de [Yang et al. \(2003\)](#) et des simulations réalisées
 - Analyse des résultats

Dans cette partie, les principes du modèle FIM-UR sont tout d'abord rappelés. Le modèle est ensuite décrit, pour le formalisme Lagrangien puis pour le formalisme Eulérien.

1 FIM-UR : un modèle d'injection pour les atomiseurs swirlés

1.1 Présentation du modèle FIM-UR

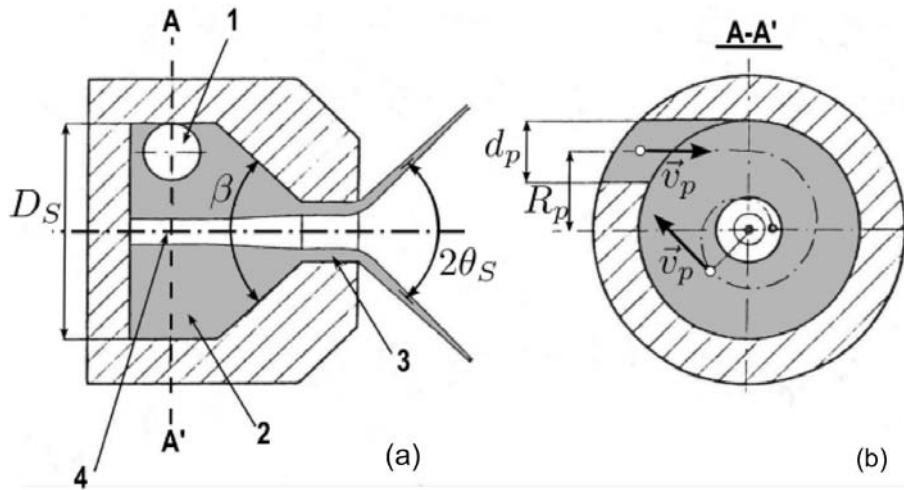


Figure 4.1: Schéma d'une coupe de l'injecteur : de profil (a) et de face (b)

La géométrie interne d'un injecteur swirlé est schématisée en Fig 4.1. Le liquide est injecté via un conduit perpendiculaire à l'axe d'injection et excentré (1), de section A_p et de diamètre d_p , tels que $A_p = \frac{\pi d_p^2}{4}$, générant un mouvement de rotation du liquide dans la cavité post injection (2) de diamètre D_S de l'injecteur. Le liquide est plaqué contre la paroi de l'injecteur et la mise en rotation du liquide implique la génération d'un noyau d'air de rayon R_a à l'intérieur de l'injecteur, puis finit par en être éjecté par la section de rayon R_0 en Fig 4.2. Le demi angle formé par les gouttes à l'extérieur de l'injecteur vaut θ_s et dépend de l'injecteur et de l'orifice de décharge. La taille de gouttes dépend de l'épaisseur du liquide dans l'injecteur et de la vitesse. Les caractéristiques du carburant ont elles aussi une importance, et l'air environnant interagit avec le liquide. Des corrélations empiriques permettent de déterminer le coefficient de décharge C_D en fonction des caractéristiques de l'injecteur (Rizk and Lefebvre (1985)). Le ratio X est défini par :

$$X = \frac{R_a^2}{R_0} = \frac{\sin^2 \theta_S}{1 + \cos^2 \theta_S} \quad (4.1)$$

et permet de définir le coefficient de décharge :

$$C_D = 1.17 \sqrt{\frac{(1-X)^3}{(1+X)}} \quad (4.2)$$

La section du conduit perpendiculaire A_p est une donnée géométrique difficile à évaluer. Taylor (1948) aidé des travaux de Carliste (1955) et Lefebvre (1989a) exprime cette section en fonction du coefficient de décharge C_D et de la surface $A_0 = \pi R_0^2$:

$$A_p = 20.73 C_D^2 A_0 \quad (4.3)$$

Ces données géométriques de l'injecteur ainsi que les caractéristiques sont les entrées du modèle FIM-UR. Elles suffisent dans le formalisme Lagrangien, pour déterminer les profils de granulométrie et de vitesse liquide à imposer à l'injecteur. Pour le formalisme Eulérien, les dimensions de l'injecteur ($R_0 \in [0.1 \text{ mm} ; 0.5 \text{ mm}]$) sont souvent trop petites pour pouvoir discrétiser correctement la section de sortie du liquide. Il est donc nécessaire d'augmenter artificiellement la taille de la section d'injection. En fonction des géométries, on peut être amené à décaler cette section d'injection en aval. Des lois de conservation entre le plan réel et le plan fictif permettent alors de reconstruire les profils à imposer dans ce plan fictif. Dans cet intervalle, on constate une perte de quantité de mouvement du liquide dû à l'air environnant.

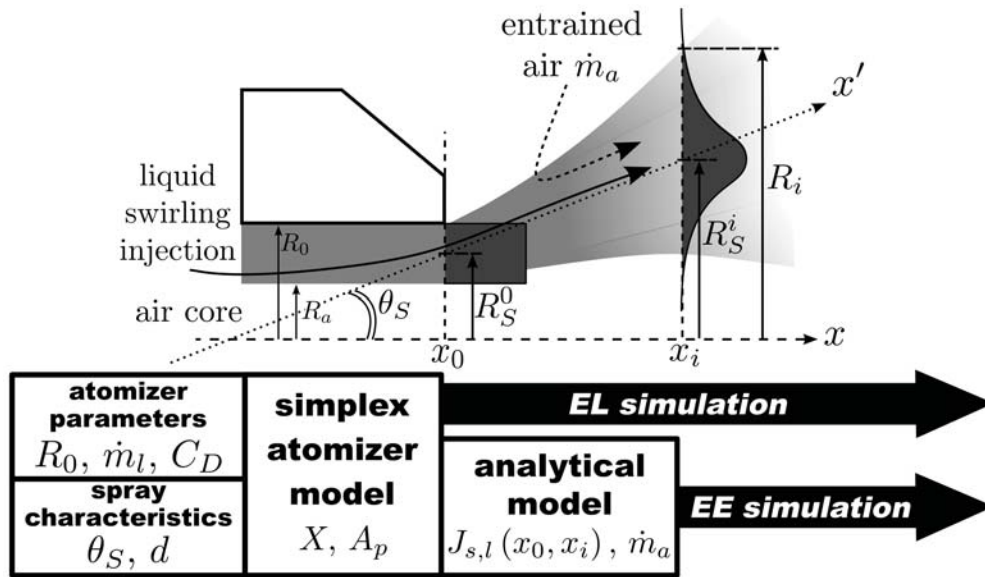


Figure 4.2: Schéma de principe du modèle FIM-UR, et des paramètres nécessaires à sa mise en place (Sanjosé et al. (2011))

La Figure 4.2 récapitule les données d'entrée nécessaires au modèle FIM-UR ainsi que les stratégies de modélisation pour les deux formalismes (Sanjosé (2009); Senoner (2010)).

1.2 Modèle Lagrangien

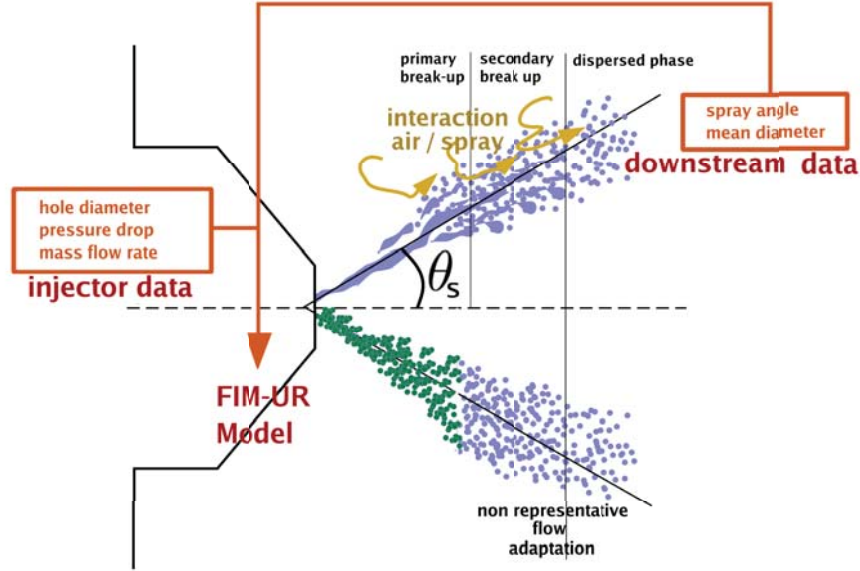


Figure 4.3: Principe du modèle FIM-UR pour le formalisme Lagrangien

Dans le formalisme Lagrangien, les paramètres de l'injecteur (R_a , R_0 et C_D), le débit \dot{m}_l et les caractéristiques du spray (θ_s et d_p) suffisent à déterminer des profils de vitesse liquide et de granulométrie du modèle FIM-UR (Fig 4.3).

On définit $R_S^0 = (R_0 + R_a)/2$. On suppose aussi que la vitesse axiale est constante dans le plan $x = x_0$ et que du fait du mouvement de giration, la vitesse orthoradiale est linéaire selon le rayon et prend son maximum en proche paroi de l'injecteur. Le liquide tournant dans la cavité est considéré comme un corps solide, ce qui implique une vitesse radiale nulle en tout point. On suppose finalement le profil de fraction volumique liquide comme étant maximum dans la zone où le liquide est présent, et nul dans le noyau d'air. Les profils de vitesse liquide et de fraction volumique liquide imposés en sortie d'injecteur ($x = x_0$) des calculs Lagrangiens représentés en Fig 4.4 sont résumés ci dessous :

$$u_{l,r}^0(\theta, r_0) = 0 \quad (4.4)$$

$$u_{l,\theta}^0(\theta, r_0) = \frac{\dot{m}}{\rho_l A_p} \frac{r_0}{R_S^0} \quad (4.5)$$

$$u_{l,x}^0(\theta, r_0) = \frac{\dot{m}}{\rho_l \pi R_0^2 (1 - X)} \quad (4.6)$$

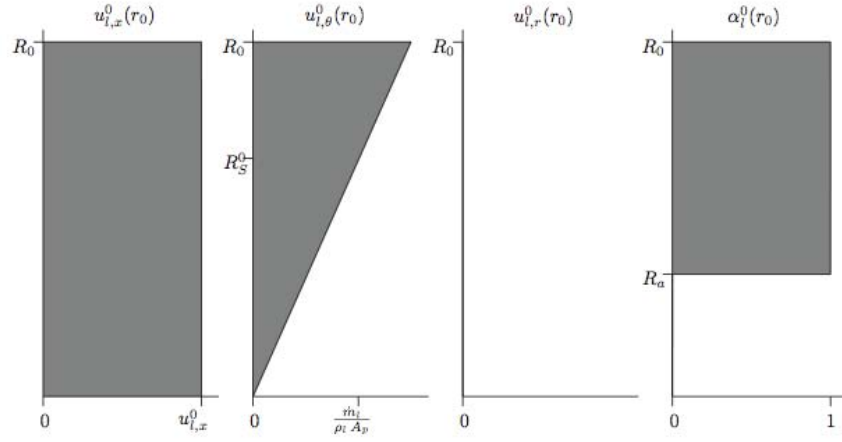


Figure 4.4: Modèle FIM-UR. Profils de vitesses liquides axiale, tangentielle, et radiale, et de fraction volumique liquide imposés en sortie d'injecteur dans le formalisme Lagrangien (Sanjosé et al. (2011))

$$\alpha_l^0(\theta, r_0) = \begin{cases} 0 & \text{si } r_0 \in [0, R_a] \\ 1 & \text{si } r_0 \in [R_a, R_0] \end{cases} \quad (4.7)$$

1.3 Modèle Eulérien

Pour le formalisme Eulérien, le fait de négliger les atomisations primaire et secondaire conduit à décaler la condition aux limites d'injection en aval de l'injecteur, en fin d'atomisation secondaire ($x = x_i$ sur la Fig. 4.5). Cette méthode présente l'avantage d'élargir la surface d'injection, ce qui permet de discrétiser correctement les profils de vitesse et de fraction volumique liquide à imposer.

Elle présente cependant l'inconvénient de modifier la géométrie de l'injecteur, et par conséquent l'aérodynamique en proche injecteur. Dans la pratique, si la géométrie de l'injecteur le permet et afin de modéliser l'impact de cette modélisation sur l'aérodynamique gazeuse, on élargit la condition d'injection Eulérienne en $x = x_0$ (Fig. 4.6).

Entre la position $x = x_0$ et $x = x_i$, les hypothèses suivantes sont faites :

- L'évaporation est négligée
- La phase liquide reste axisymétrique autour de son axe d'injection
- La vitesse axiale ne dépend pas de la coordonnée radiale
- Pour reproduire un cône creux, le profil de fraction volumique liquide est assimilé à une gaussienne à la position $x = x_i$

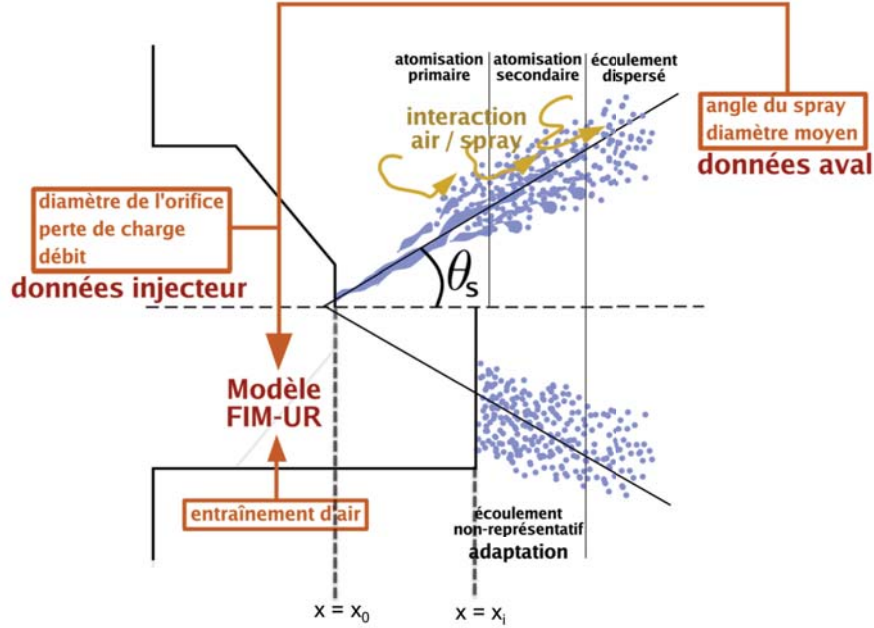


Figure 4.5: Principe du modèle FIM-UR pour le formalisme Eulérien

Ces hypothèses permettent de réduire la vitesse axiale liquide à une constante, les vitesses liquides radiale et orthoradiale à des fonctions linéaires en r et la fraction volumique liquide à une gaussienne dépendante de r centré en μ (Eqs 4.8,4.9,4.10, 4.11 et Fig. 4.7). En réalité, le profil de vitesse axiale liquide n'est pas constant mais tend vers zéro aux bords de la condition d'injection pour éviter un cisaillement trop fort à la paroi. Afin de conserver le débit, Sanjosé et al. (2011) choisissent de modifier la valeur de la vitesse axiale liquide maximale en $x = x_i$.

$$u_{l,r}^i(\theta, r) = u_{l,r}^i(r) \quad (4.8)$$

$$u_{l,\theta}^i(\theta, r) = u_{l,\theta}^i(r) \quad (4.9)$$

$$u_{l,x}^i(\theta, r) = u_{l,x}^i|_{mean} \quad (4.10)$$

$$\alpha_l^i(\theta, r) = \alpha_l^i|_{max} \cdot e^{\frac{-(r-\mu)^2}{\sigma^2}} \quad (4.11)$$

Ces équations introduisent de nouveaux paramètres ($u_{l,x}^i|_{mean}$, $\alpha_l^i|_{max}$, μ et σ) ainsi que deux fonctions ($u_{l,r}^i(r)$ et $u_{l,\theta}^i(r)$). Pour les déterminer, certaines considérations sont nécessaires :

- La conservation de la masse liquide implique que le débit liquide en $x = x_i$ soit égal au débit imposé \dot{m}_l

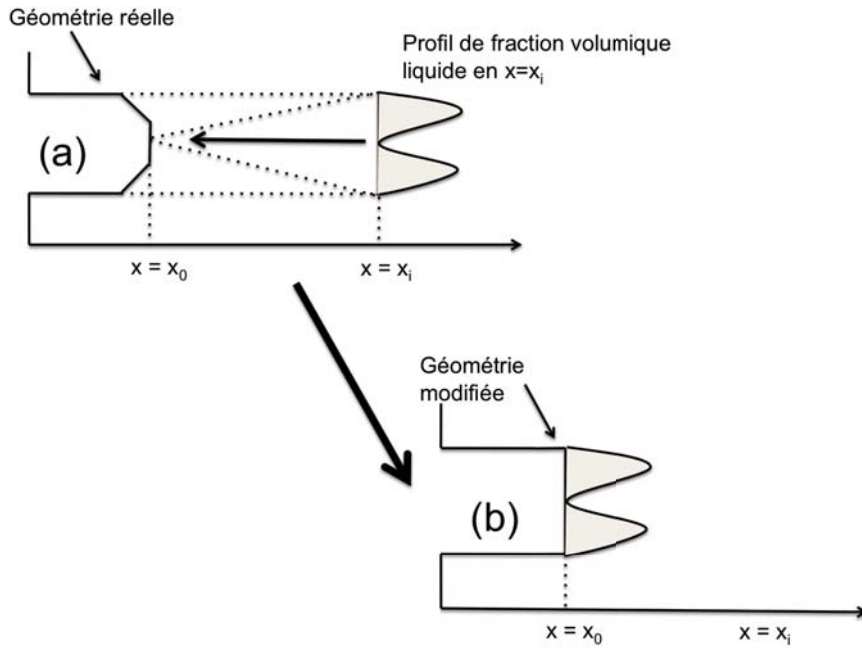


Figure 4.6: Principes du modèle FIM-UR pour le formalisme Eulérien : déplacement des profils calculés en $x = x_i$ à la position $x = x_0$

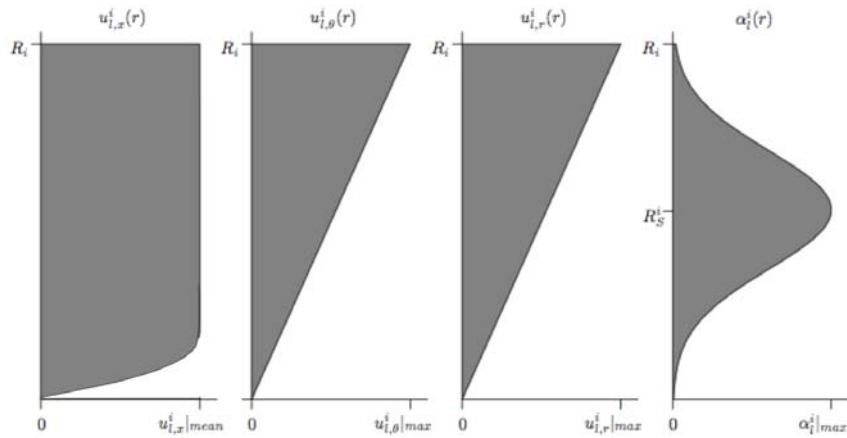


Figure 4.7: Modèle FIM-UR. Profils de vitesses liquides axiale, tangentielle, et radiale, et de fraction volumique liquide imposés dans le formalisme Eulérien (Sanjosé et al. (2011))

- La conservation de l'angle de spray induit que le maximum de fraction volumique liquide soit localisé le long du spray

- L'évaporation est négligée
- L'échange de quantité de mouvement entre les deux phases a lieu préférentiellement dans la direction axiale
- Les gouttes ont donc un comportement balistique dans le plan perpendiculaire à l'injecteur

1.3. 1) Évaluation des composantes radiale et orthoradiale dans le plan $x = x_i$

La dernière considération implique l'invariance des composantes radiale et orthoradiale de la vitesse liquide entre les plans $x = x_0$ et $x = x_i$, ce qui permet d'exprimer chacune de ces contributions à partir de la vitesse orthoradiale du plan $x = x_0$ (Fig 4.8).

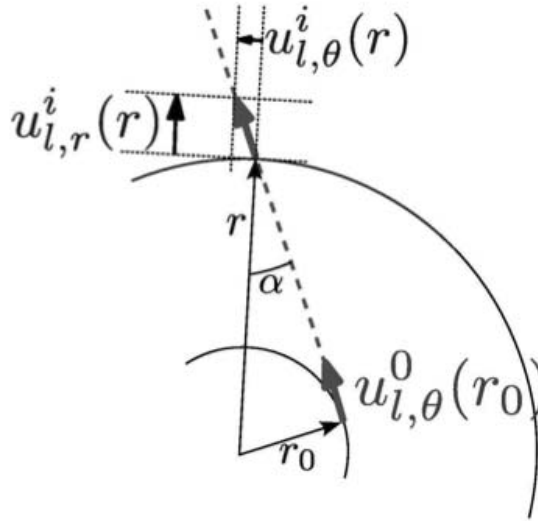


Figure 4.8: Modèle FIM-UR. Projection de la composante orthoradiale du plan $x = x_0$ sur le plan $x = x_i$ (Sanjosé (2009))

Cette projection donne les expressions des vitesses radiale et orthoradiale dans le plan $x = x_i$:

$$u_{l,r}^i(r) = u_{l,\theta}^0(r_0) \cos(\alpha) = u_{l,\theta}^0 \frac{\sqrt{r^2 - r_0^2}}{r} \quad (4.12)$$

$$u_{l,\theta}^i(r) = u_{l,\theta}^0(r_0) \sin(\alpha) \quad (4.13)$$

avec α l'angle de projection (Fig. 4.8).

En faisant l'approximation :

$$\frac{r}{r_0} \approx \frac{R_S^i}{R_S^0} \quad (4.14)$$

on a :

$$u_{l,r}^i(r) = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l A_p} \sqrt{1 - \left(\frac{R_S^0}{R_S^i}\right)^2} \frac{r}{R_S^i} \quad (4.15)$$

$$u_{l,\theta}^i(r) = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l A_p} \frac{R_S^0}{R_S^i} \frac{r}{R_S^i} \quad (4.16)$$

1.3. 2) Débit liquide à la position $x = x_i$

On écrit la conservation du débit liquide à la position $x = x_i$.

$$\dot{m}_l = \int_0^{R_i} \int_0^{2\pi} \rho_l u_{l,x}^i \alpha_l^i r d\theta dr \quad (4.17)$$

La conservation de l'angle implique que la gaussienne centrée en μ qui définit α_l^i (éq. 4.11) voit son maximum en $R_S(x_i) = R_S^0 + (x_i - x_0)\tan(\theta_S) = R_S^i$ donc $\mu = R_S^i$.

$$\dot{m}_l = \pi \rho_l u_{l,x}^i |_{mean} \alpha_l^i |_{max} \left[\sigma^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{R_i^2}{\sigma^2}\right) \right) + \sigma R_S^i \sqrt{\pi} \operatorname{erf}\left(\frac{R_i}{\sigma}\right) \right] \quad (4.18)$$

En réalité, le calcul de \dot{m}_l est effectué par une méthode d'intégration numérique.

1.3. 3) Conservation de la quantité de mouvement

La conservation de quantité de mouvement s'écrit :

$$J_{l,x}^i = J_{l,x}^0 + J_{l,x}(x_0, x_i) \quad (4.19)$$

avec $J_{l,x}^0$ et $J_{l,x}^i$ les flux de quantité de mouvement en $x = x_0$ et $x = x_i$, et $J_{l,x}$ le terme d'échange de quantité de mouvement dû à la traînée.

$J_{l,x}^0$ et $J_{l,x}^i$ s'obtiennent par intégration sur la surface de l'injecteur ($x = x_0$) et sur la surface de la condition d'injection ($x = x_i$) respectivement.

$$J_{l,x}^0 = \int_0^{R_0} 2\pi \rho_l \alpha_l^0 (u_{l,x}^0)^2 r dr = \dot{m}_l u_{l,x}^0 \quad (4.20)$$

$$J_{l,x}^i = \int_0^{R_i} 2\pi \rho_l \alpha_l^i (u_{l,x}^i)^2 r dr = \dot{m}_l u_{l,x}^i |_{mean} \quad (4.21)$$

Le dernier terme $J_{l,x}$ est calculé en utilisant le modèle d'entraînement d'air de [Cossali \(2001\)](#). Ce modèle initialement utilisé pour les cônes pleins, fait les hypothèses suivantes :

- Les conditions de pression et de température sont ambiantes
- Le couplage entre les deux phases se fait uniquement par la traînée
- Les gouttes sont sphériques
- Les profils de vitesse axiale liquide, vitesse axiale gazeuse et fraction volumique liquide sont auto-similaires

On introduit la variable ξ telle que :

$$\xi = \frac{r}{R_S(x)} = \frac{r}{R_S^0 + (x - x_0)\tan\theta_S} \quad (4.22)$$

L'hypothèse d'auto-similarité des vitesses axiale liquide, axiale gazeuse, et de la fraction volumique liquide s'écrit (Cossali (2001)) :

$$u_{g,x}(r, x) = W(x)f(\xi) \quad (4.23)$$

$$u_{l,x}(r, x) = U(x)f(\xi) \quad (4.24)$$

$$\alpha_l(r, x) = N(x)\phi(\xi) \quad (4.25)$$

où f et ϕ sont des fonctions auto-similaires, et W , U et N sont les variations axiales d'amplitude. Pour les profils de vitesse, la fonction auto-similaire f correspond à un jet turbulent rond dans une atmosphère au repos.

$$f(\xi) = \frac{1}{(1 + a\xi^2)^2} \text{ avec } a = \sqrt{2} - 1 \quad (4.26)$$

La constante a est choisi pour que le plan de symétrie du jet soit confondu avec l'axe d'injection.

Pour la fraction volumique de liquide, la fonction auto-similaire ϕ est définie pour être minimale sur l'axe.

$$\phi(\xi) = \frac{b\xi^2}{(1 + c\xi^2)^4} \text{ avec } b = 256/81 \text{ et } c = 1/3 \quad (4.27)$$

Les paramètres b et c sont définis afin de normaliser la fonction ϕ et de prendre $\phi(1) = 1$

L'air étant entraîné par le spray, des conditions aux limites gazeuses doivent également être spécifiées à la position $x = x_i$. On suppose que la vitesse axiale gazeuse est indépendante de la coordonnée radiale : $u_{g,x}(x, \theta, r) = u_{g,x}(x)$. A la position $x = x_i$, on a : $u_{g,x}(x_i) = u_{g,x}^i|_{mean}$

Des expériences réalisées par Prosperi et al. (2007) ont montré que le débit d'air entraîné par un spray en forme de cône creux possédait un comportement équivalent à la puissance $3/2$ de la distance à l'injecteur ainsi qu'une dépendance sous la forme d'une masse volumique gazeuse à la puissance $5/6$:

$$\dot{m}_a = K_a \rho_g^{5/6} (x_i - x_0)^{3/2} \quad (4.28)$$

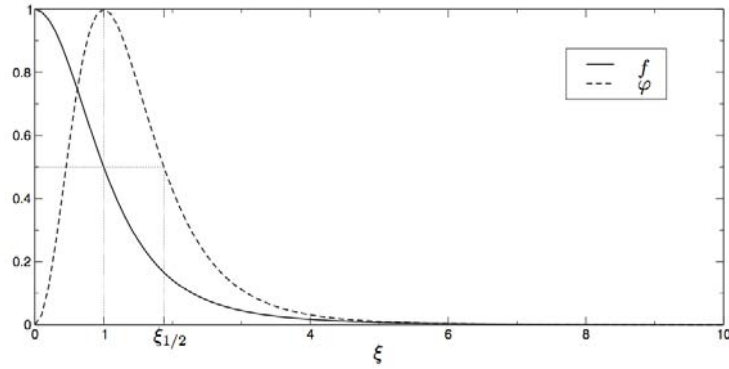


Figure 4.9: Modèle FIM-UR. Représentation des fonctions auto-similaires f et ϕ pour les vitesses axiales liquide et gazeuse et pour la fraction volumique liquide (Sanjosé (2009))

Le débit d'air entraîné \dot{m}_a à la position $x = x_i$ peut être écrit ainsi : $\dot{m}_a = \pi R_i^2 \rho_g u_{g,x}^i$. En utilisant l'éq. 4.28, on peut alors évaluer la vitesse axiale gazeuse à la position $x = x_i$:

$$u_{g,x}^i = \frac{K_a(x_i - x_0)^{3/2}}{\pi R_i^2 \rho_g^{1/6}} \quad (4.29)$$

Le débit d'air entraîné \dot{m}_a est lié au débit liquide \dot{m}_l , à la distance à l'injecteur et au coefficient d'entraînement d'air $\Lambda(x)$.

$$\dot{m}_a(x) = \Lambda(x) \dot{m}_l (x - x_0) / 2R_0 \quad (4.30)$$

Ce coefficient s'exprime avec l'aide des travaux de Cossali (2001) :

$$\Lambda(x) = H_0 \left(\frac{2R_0 \mu}{\dot{m}_l} \right)^{1/6} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^{5/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \left(\frac{x - x_0}{2R_0} \right)^{1/2} \quad (4.31)$$

$$H_0 = \sqrt{3} \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{2\pi Q^2 R C_M^{2/3}}{M B^{1/3} C^{2/3}} \right)^{1/2} \text{ avec } \dot{m}_a(x_0) = 0 \quad (4.32)$$

Les constantes sont Q , M , B , C , et R sont calculées par intégration des fonctions d'auto-similarité f et ϕ (eq 4.26 et 4.27) qui font appel à l'intégrale de Gradshteyn and Ryzhik (1980) (eq. 4.33). La fonction ${}_2F_1$ est la première fonction hypergéométrique de Gauss. Les valeurs sont rappelées dans la table 4.1.

$$\int_0^\infty \frac{x^{\mu-1}}{(1+\beta x)^\nu} dx = \beta^{-\mu} \cdot \text{B}(\mu, (\nu - \mu)) \text{ if } |\arg(\beta)| < \pi, \text{Re}(\nu) > \text{Re}(\mu) > 0 \quad (4.33)$$

où B est la fonction Beta telle que :

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt \quad (4.34)$$

$$Q = \int_0^\infty f(\xi) \xi d\xi = \frac{1}{2(\sqrt{(2)} - 1)} \quad (4.35)$$

$$M = \int_0^\infty f^2(\xi) \xi d\xi = \frac{1}{6(\sqrt{(2)} - 1)} \quad (4.36)$$

$$B = \int_0^\infty f(\xi) \phi(\xi) \xi d\xi = \frac{32}{45} {}_2F_1(2, 2; 6; 4 - 3\sqrt{2}) \quad (4.37)$$

$$C = \int_0^\infty f^2(\xi) \phi(\xi) \xi d\xi = \frac{64}{189} {}_2F_1(4, 2; 8; 4 - 3\sqrt{2}) \quad (4.38)$$

$$R = \int_0^\infty f(\xi) |f(\xi)|^{2/3} \phi(\xi) \xi d\xi = \frac{8}{19} {}_2F_1\left(\frac{10}{3}, 2; \frac{22}{3}; 4 - 3\sqrt{2}\right) \quad (4.39)$$

avec :

${}_2F_1(2, 2; 6; 4 - 3\sqrt{2})$	0.85998
${}_2F_1(4, 2; 8; 4 - 3\sqrt{2})$	0.79844
${}_2F_1(\frac{10}{3}, 2; \frac{22}{3}; 4 - 3\sqrt{2})$	0.81465

Table 4.1: Valeurs tabulées de la fonction ${}_2F_1$

Le coefficient C_M vaut :

$$C_M = \frac{R_0^2 \int_0^{R_0} [\alpha_l^0 u_{l,x}^0(r_0)]^2 r_0 dr_0}{2(\int_0^{R_0} \alpha_l^0(r_0) u_{l,x}^0(r_0) r_0 dr_0)^2} = \frac{1}{1 - X} \quad (4.40)$$

Finalement, en utilisant l'éq. 4.28 et les éq. 4.30 à 4.40, le paramètre K_a vaut :

$$K_a = H_0 \left(\frac{2R_0\mu}{\dot{m}_l} \right)^{1/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \frac{\dot{m}_l}{(2R_0)^{2/3} \rho_l^{5/6}} \quad (4.41)$$

Enfin, le terme d'échange de quantité de mouvement $J_{s,l}(x_0; x_i)$ s'exprime grâce à [Cossali \(2001\)](#) :

$$J_{s,l}(x_0, x_i) = -\Lambda^2(x_i) \frac{\dot{m}_l^2 M}{8\pi R_0^2 \rho Q^2} \quad (4.42)$$

Ces dernières dérivations permettent de déterminer tous les paramètres du modèle FIM-UR.

Pour alléger les équations finales, on définit :

$$R_S^0 = \frac{1 + \sqrt{X}}{2} R_0 \quad (4.43)$$

$$L_{inj} = \frac{R_S^i - R_S^0}{\tan \theta_s} \quad (4.44)$$

$$A_u = \frac{1}{\rho_l(1 - X)} - \Lambda^2(x_i) \frac{M}{8\rho Q^2} \quad (4.45)$$

$$I_\alpha = \int_0^{R_i} \int_0^{2\pi} e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} r d\theta dr \quad (4.46)$$

$$\Lambda(x_i) = H_0 \left(\frac{2R_0 R_S^i}{\dot{m}_l} \right)^{1/6} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^{5/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \left(\frac{L_{inj}}{2R_0} \right)^{1/2} \quad (4.47)$$

On obtient finalement :

$$u_{l,r}^i(\theta, r) = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l A_p} \sqrt{1 - \frac{R_S^0{}^2}{R_S^i}} \frac{r}{R_S^i} \quad (4.48)$$

$$u_{l,\theta}^i(\theta, r) = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l A_p} \frac{R_S^0}{R_S^i} \frac{r}{R_S^i} \quad (4.49)$$

$$u_{l,x}^i(\theta, r) = \frac{\dot{m}_l}{\pi R_0^2} A_u \quad (4.50)$$

$$\alpha_l^i(\theta, r) = \frac{\pi R_0^2}{\rho_l I_\alpha A_u} e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} \quad (4.51)$$

Les profils Eulériens sont donc calculés sur le plan $x = x_i$ mais appliqués en $x = x_0$.

2 Améliorations du modèle FIM-UR de *Sanjosé (2009)*

Dans cette partie, trois améliorations du modèle FIM-UR sont apportées : une évaluation analytique du débit liquide, l'utilisation de profils auto-similaires plus physiques, ainsi que la modification du profil de vitesse axiale liquide en $x = x_i$. On nommera sous le nom FIM-UR_mod, le modèle FIM-UR amélioré.

2.1 Evaluation du débit liquide

L'intégration numérique permettant de calculer le débit liquide axial à $x = x_i$ peut amener à une mauvaise estimation pour des maillages peu résolus. Une alternative est d'utiliser une expression analytique du débit.

Le débit liquide s'écrit :

$$\dot{m}_l = 2\pi\rho_l u_{l,x}^i|_{mean} \alpha_l^i|_{max} \int_0^{R_i} r e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr \quad (4.52)$$

où l'intégrale $\int r e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr$ est calculée ci-dessous :

Par définition,

$$\int e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{erf}(x) \quad (4.53)$$

donc :

$$\int e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \sigma \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) \quad (4.54)$$

Une intégration par parties de l'intégrale $\int r e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr$ donne :

$$\int r e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr = -r \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sigma \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sigma \int \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) dr \quad (4.55)$$

En utilisant l'éq.(4.54), on a :

$$\frac{d}{dr} \left[\text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) \right] = -\frac{2}{\sqrt{\pi}\sigma} e^{\frac{-(R_S^i - r)^2}{\sigma^2}} \quad (4.56)$$

L'intégration par partie du second terme de droite dans l'éq.(4.55) donne :

$$\int \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) dr = -(R_S^i - r) \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) - \int (R_S^i - r) \frac{2}{\sqrt{\pi}\sigma} e^{\frac{-(R_S^i - r)^2}{\sigma^2}} dr \quad (4.57)$$

Finalement, le changement de variable

$$X = \left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right)^2 \text{ et } dX = -2\frac{(R_S^i - r)}{\sigma^2} dr \quad (4.58)$$

permet d'évaluer le dernier terme de l'éq.(4.57) :

$$\int \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) dr = -(R_S^i - r) \text{erf}\left(\frac{R_S^i - r}{\sigma}\right) - \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-(R_S^i - r)^2}{\sigma^2}} \quad (4.59)$$

$$\int r e^{\frac{-(r-R_S^i)^2}{\sigma^2}} dr = -R_S^i \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sigma \operatorname{erf} \left(\frac{R_S^i - r}{\sigma} \right) - \frac{\sigma^2}{2} e^{\frac{-(R_S^i - r)^2}{\sigma^2}} \quad (4.60)$$

Finalement, l'éq. 4.52 devient :

$$\begin{aligned} \dot{m}_l = \pi \rho_l u_{l,x}^i |_{mean} \alpha_l^i |_{max} & \left[\sigma^2 \left(e^{\frac{-(R_S^i)^2}{\sigma^2}} - e^{\frac{-(R_S^i - R_i)^2}{\sigma^2}} \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{\pi} R_S^i \sigma \left(\operatorname{erf} \left(\frac{R_S^i}{\sigma} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{R_S^i - R_i}{\sigma} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.61)$$

L'évaluation du débit n'est donc plus dépendante de la résolution du maillage.

2.2 Calcul de l'entraînement d'air

Les fonctions auto-similaires de *Cossali (2001)* sont utilisées dans *Sanjosé (2009)* pour calculer le coefficient d'entraînement d'air. Le choix d'une fonction représentant un jet turbulent rond pour les vitesses axiales est cependant discutable compte tenu de la structure d'un jet swirlé creux. Dans ce travail, on propose de prendre la même fonction auto-similaire pour les vitesses et la fraction volumique liquide (Fig.4.10) :

$$f(\xi) = \phi(\xi) = \frac{b\xi^2}{(1 + c\xi^2)^4} \quad (4.62)$$

où les constantes b et c sont les mêmes que dans *Sanjosé (2009)*. L'entraînement d'air est donc réévalué, les constantes Q , B , M , C et R (éqs. 4.31-4.39) en fonction de la nouvelle forme de f :

$$Q = \int_0^\infty \frac{b\xi^3}{(1 + c\xi^2)^4} d\xi = \frac{b}{2} \int_0^\infty \frac{x}{(1 + cx)^4} dx = \frac{b}{12c^2} \quad (4.63)$$

$$M = \int_0^\infty \frac{b^2\xi^5}{(1 + c\xi^2)^8} d\xi = \frac{b^2}{2} \int_0^\infty \frac{x^2}{(1 + cx)^8} dx = \frac{b^2}{210c^3} \quad (4.64)$$

$$B = M = \frac{b^2}{210c^3} \quad (4.65)$$

$$C = \int_0^\infty \frac{b^3\xi^7}{(1 + c\xi^2)^{12}} d\xi = \frac{b^3}{2} \int_0^\infty \frac{x^3}{(1 + cx)^{12}} dx = \frac{b^3}{2640c^4} \quad (4.66)$$

$$R = \int_0^\infty \frac{b^{8/3}\xi^{11/3}}{(1 + c\xi^2)^{16/3}} d\xi = \frac{b^{8/3}}{2} \int_0^\infty \frac{x^{4/3}}{(1 + cx)^{16/3}} dx = \frac{27b^{8/3}}{910c^{7/3}} \quad (4.67)$$

La formule de *Gradshteyn and Ryzhik (1980)* (eq. 4.33) est utilisée pour déterminer ses 5 constantes.

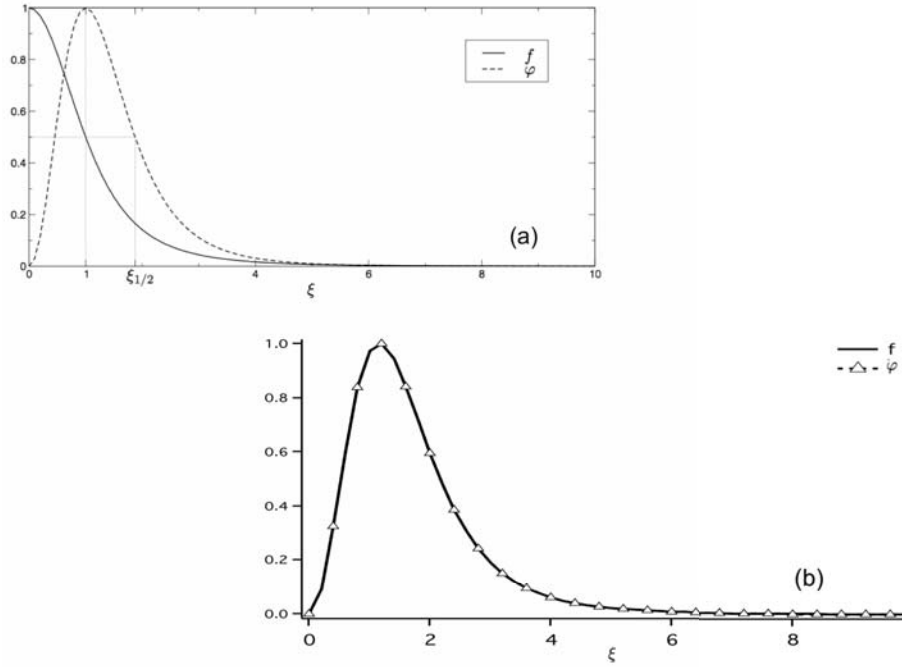


Figure 4.10: Fonctions auto-similaires f et ϕ pour la vitesse axiale liquide et la fraction volumique liquide. Comparaison entre le modèle d'origine de Sanjosé (2009) (a) et le présent travail (b)

Si cette modification rend le modèle FIM-UR plus consistant, elle a peu d'impact sur les résultats puisque l'entraînement d'air reste faible comparé à l'écoulement liquide. Les différences en termes de profil d'entraînement d'air sont présentées en Fig. 4.11, tandis que les constantes sont comparées en table 4.2. Le nouvel entraînement d'air est globalement trois fois plus important que dans le modèle d'origine de Sanjosé (2009).

2.3 Profils en entrée

Afin de conserver une bonne dynamique de spray, on choisit de conserver le débit en $x = x_i$ en ajustant la fraction volumique liquide plutôt que la vitesse axiale comme l'avait fait Sanjosé et al. (2011) (Fig. 4.7). Une comparaison entre le modèle d'origine et le modèle modifié des vitesses axiales liquides et des fractions volumiques liquides en $x = x_i$ est donnée en Fig. 4.12.

Coefficient	Q	M	B	C	R
FIM-UR	1.21	0.42	0.61	0.27	0.343
FIM-UR_mod	2.37	1.28	1.28	0.67	8.28

Table 4.2: Coefficients d'entraînement d'air : comparaison entre le modèle d'origine de [Sanjosé \(2009\)](#) et le présent travail

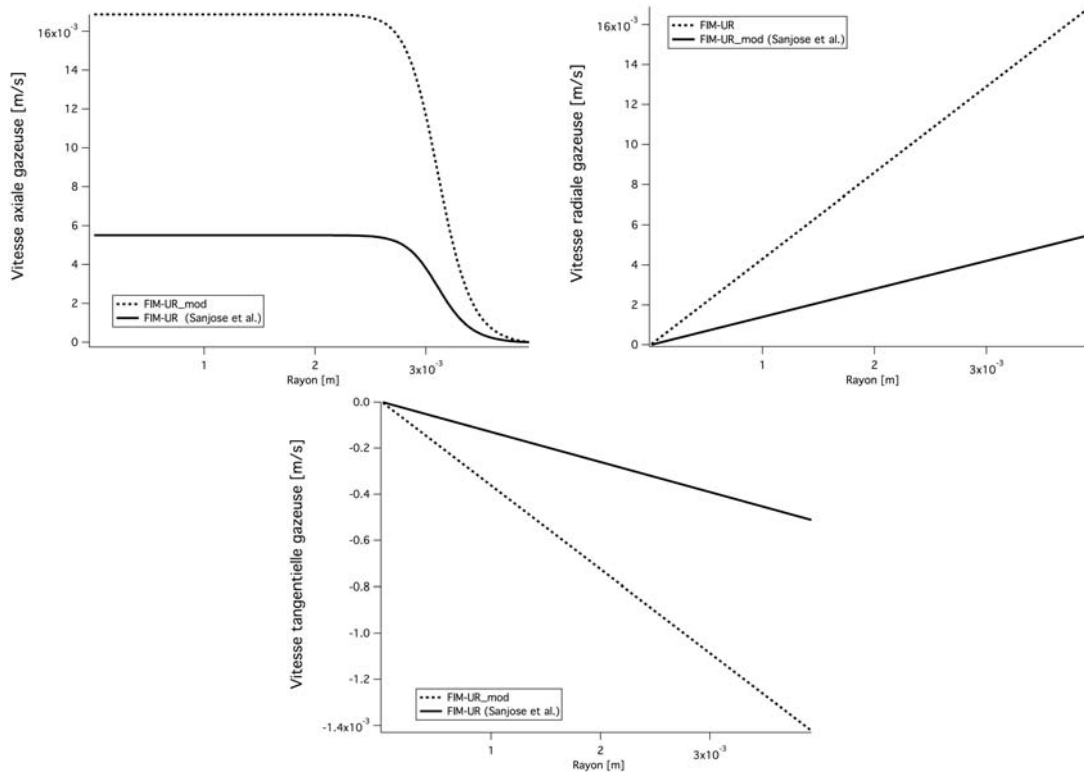
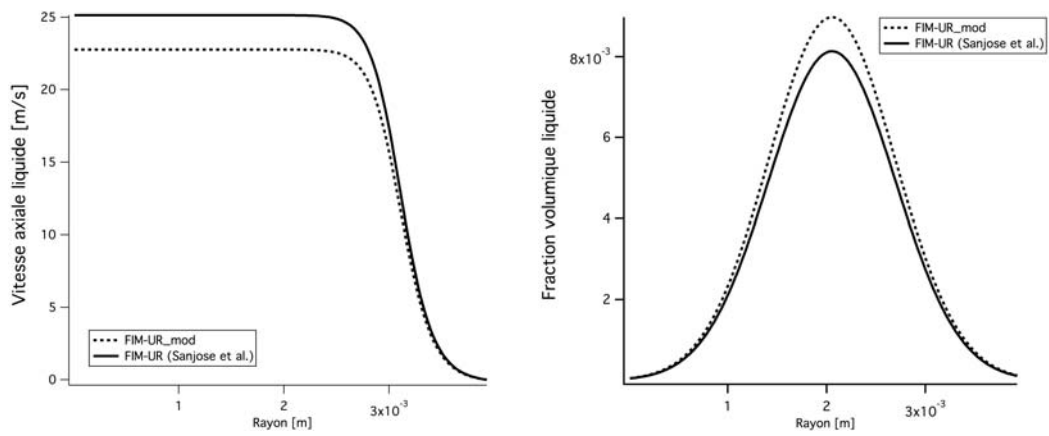


Figure 4.11: Profils d'entraînement d'air supposés en $x = x_i$: comparaison entre le modèle d'origine de [Sanjosé \(2009\)](#) et le présent travail



(a) Comparaison des profils de vitesses axiales liquides en $x = x_i$ (b) Comparaison des profils de fractions volumiques liquides en $x = x_i$

Figure 4.12: Vitesse axiale liquide en $x = x_i$: comparaison entre le modèle d'origine de Sanjosé (2009) et le présent travail

3 Présentation de la configuration de validation

3.1 Configuration de Yang et al. (2003)

Un injecteur pressurisé swirlé Delavan (source <http://www.delavaninc.com>) placé dans une chambre cylindrique de longueur $L = 140 \text{ mm}$ et de diamètre $D = 120 \text{ mm}$ a été étudié (Fig 4.13). Des mesures de profil de vitesse axiale liquide et de diamètre moyen de Sauter à différentes positions axiales en aval de l'injecteur sont proposées pour plusieurs points de fonctionnement (débit liquide) et types d'injecteur. Pour réaliser ces mesures, un système PDPA a été utilisé. Par ailleurs, un système d'approvisionnement en carburant et un collecteur ont été équipés d'un système de visualisation directe utilisant une caméra haute fréquence, d'un laser à Argon et d'une lentille permettant d'obtenir des photographies du spray.

Les deux injecteurs utilisés sont présentés en Fig. 4.14. L'injecteur choisi pour cette étude est un injecteur plat possédant un orifice de décharge $R_0 = 0.25 \text{ mm}$, étant le plus proche de l'injecteur utilisé sur le banc MERCATO. En effet, il possède un rayon R_0 identique, et le canal interne d'approvisionnement de l'injecteur plat (Fig. 4.14 (a)) est lui aussi droit comme énoncé dans le modèle FIM-UR (Fig. 4.1), et non pas courbe. Les données de Yang et al. (2003) en termes de granulométrie, donnent une évolution croissante des diamètres de l'expérience pour des distances de plus en plus grandes en aval de l'injecteur, alors que les conditions sont à pression et température ambiante. Cette incohérence nous pousse donc à ne pas effectuer de comparaison en termes de profils de diamètres. Néanmoins, la granulométrie en entrée de notre modèle est nécessaire et est discutée dans la partie suivante.

Les caractéristiques de l'injecteur (diamètre de l'orifice d'injection et coefficient de décharge) sont données en table 4.3.

Diamètre de l'orifice d'injection	0.5 mm
Coefficient de décharge C_D	0.93

Table 4.3: Caractéristiques de l'atomiseur de Yang et al. (2003)

3.2 Point de fonctionnement

Le point de fonctionnement simulé est donné dans le tableau 4.4. Aucune indication n'est donnée par Yang et al. (2003) en ce qui concerne la granulométrie du spray en sortie d'injecteur. Les profils de diamètres moyens en proche injection ont été utilisés pour déterminer un diamètre de goutte $d_p = 60 \text{ }\mu\text{m}$. Le formalisme Lagrangien permettant de prendre facilement en compte la polydispersion, une injection polydisperse modélisée par une distribution Rosin-Rammler (eq. 5.35,

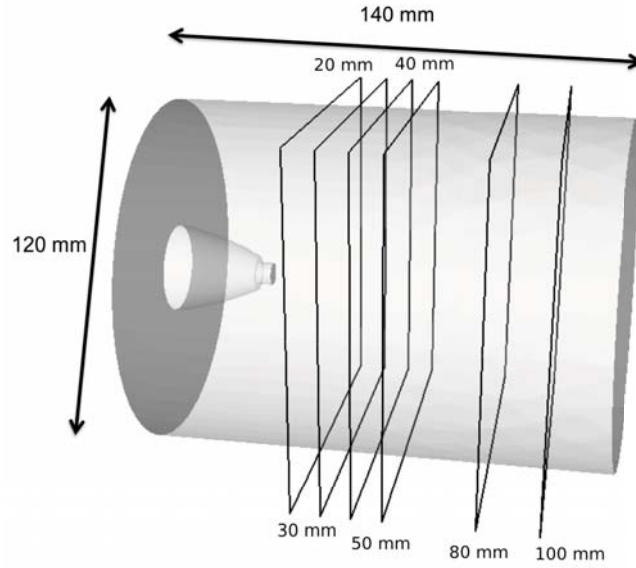
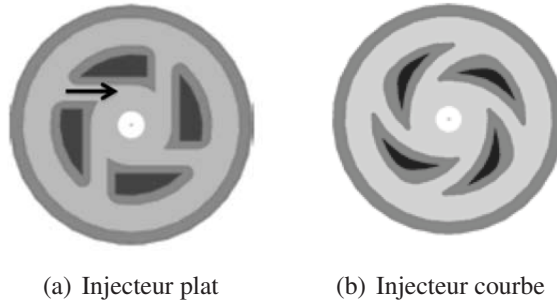


Figure 4.13: Représentation du domaine de calcul et positions axiales des plans de mesures de Yang et al. (2003)



(a) Injecteur plat

(b) Injecteur courbe

Figure 4.14: Différents types d'injecteurs utilisés par Yang et al. (2003)

caractéristique de ce type d'injecteur a été choisie), le SMD égal à $60 \mu m$ et un facteur q valant 2.25 (Fig 4.15) a été choisi (valeur communément rencontrée dans nos applications et qui correspond au facteur de la distribution du chapitre 6)

$$f(d_p) = q(d_{p,m})^{-q} d_p^{q-1} \exp \left[- \left(\frac{d_p}{d_{p,m}} \right)^q \right] \quad (4.68)$$

Les caractéristiques de l'injecteur permettent de calculer les paramètres du modèle FIM-UR, le Ratio X et la surface A_p , données en table 4.5.

Demi angle de spray	30°
Taille de gouttes	60 μm monodisperse
	$SMD = 60 \mu m$ $q = 2.25$ polydisperse
Débit liquide	3 $g.s^{-1}$

Table 4.4: Point de fonctionnement étudié

Ratio X	0.143
A_p	3.5 $e^{-6} m^2$

Table 4.5: Paramètres du modèle FIM-UR pour la configuration de [Yang et al. \(2003\)](#)

3.3 Géométries calculées, maillages et conditions aux limites

Comme expliqué dans la partie 1.3, une modification de la géométrie est réalisée pour le formalisme Eulérien (Fig. 4.16).

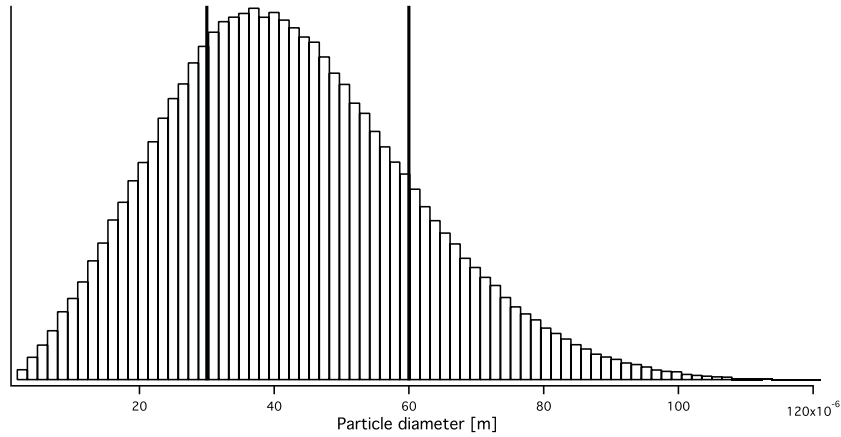
	Nombre de noeuds	Nombres de cellules	Pas de temps
meshEL	162 636	963958	0.26 e^{-6} s
meshEE	141540	807575	0.28 e^{-6} s
meshEE_fine	3 453 394	20 076 632	0.16 e^{-6} s

Table 4.6: Paramètres des maillages

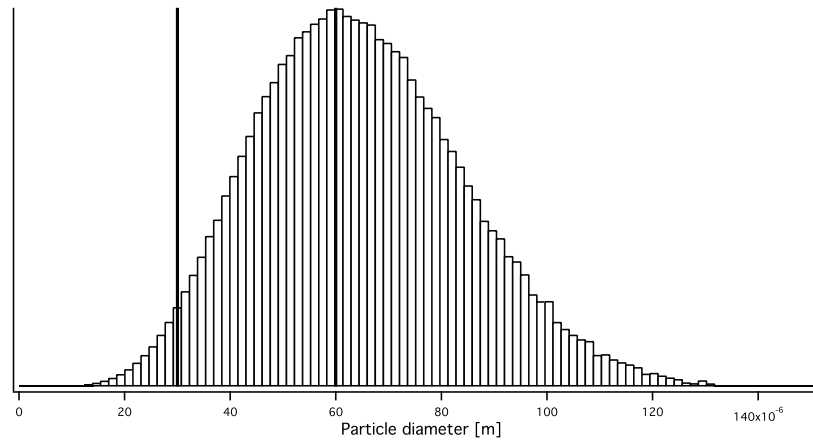
Les caractéristiques des maillages sont référencées dans le tableau 4.7. Les maillages meshEL et meshEE sont identiques, excepté les mailles supplémentaires induites par la modification géométrique de l’injecteur pour les calculs Eulériens (4.17). Le maillage meshEE_fine s’appuie sur la même géométrie que le maillage meshEE, mais est raffiné dans la zone de spray.

3.4 Conditions aux limites

Pour la phase gazeuse, les conditions NSCBC ([Poinsot and Lele \(1992\)](#)) ont été utilisées en entrée d’injecteur et en sortie. Un écoulement co-courant d’air faible (vitesse = 6 m/s) a été imposé en aval de l’injecteur, à l’entrée de la chambre, pour éviter des problèmes numériques en proche injecteur. En plus du modèle FIM-UR pour l’injecteur et d’une sortie convective, des murs glissants ont été utilisés pour les calculs Eulériens et un modèle de rebond élastique pour les calculs



(a) Distribution numérique



(b) Distribution volumique

Figure 4.15: Distribution de tailles de goutte utilisée pour la calcul polydisperse, les traits continus séparent la distribution en différentes classes : (a) Distribution numérique ; (b) Distribution volumique (le trait continu à $60 \mu m$ représente aussi le diamètre des calculs monodisperses)

Lagrangiens, afin d'éviter une accumulation de gouttes en proche paroi. Néanmoins, les gouttes n'atteignent que très rarement les parois, car le diamètre de la chambre est suffisamment grand devant l'expansion du jet liquide.

Un rappel graphique des conditions aux limites est donnée en Fig 4.18.

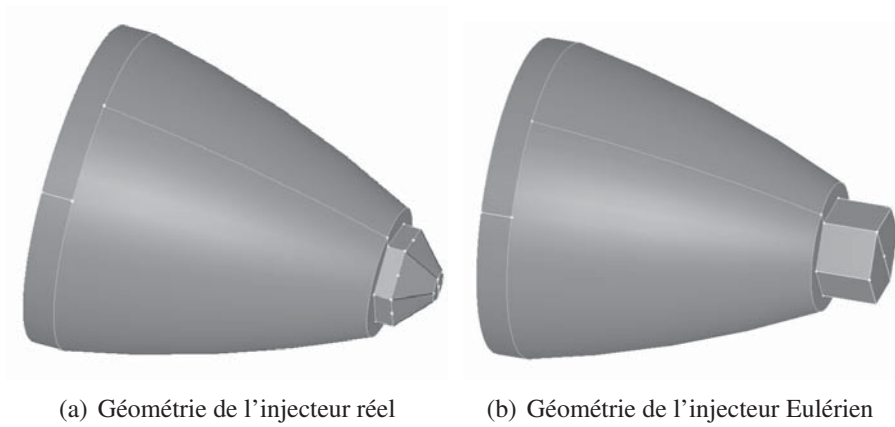


Figure 4.16: Représentation des différences géométriques pour l'injecteur

3.5 Caractéristiques des simulations réalisées

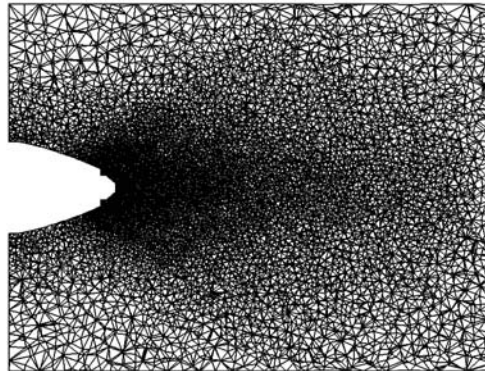
Toutes les simulations ont été réalisées avec le schéma TTGC (Colin and Rudgyard (2000)). La table 4.7 détaille les caractéristiques des 6 simulations effectuées, le maillage, la distribution et le formalisme.

Run	Géométrie et Maillage	Distribution de gouttes	Formalisme	Modèle
EL_Mono	meshEL	Monodisperse	Lagrangien	FIM-UR
EL_Poly	meshEL	Polydisperse	Lagrangien	FIM-UR
EL_Mono_on_meshEE	meshEE	Monodisperse	Lagrangien	FIM-UR
EE	meshEE	Monodisperse	Eulérien	FIM-UR
EE_fine	meshEE_fine	Monodisperse	Eulérien	FIM-UR
EE_fine_mod	meshEE_fine	Monodisperse	Eulérien	FIM-UR_mod

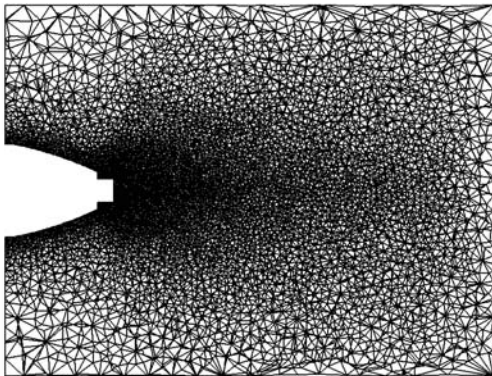
Table 4.7: Caractéristiques des différentes simulations

Les objectifs sont multiples :

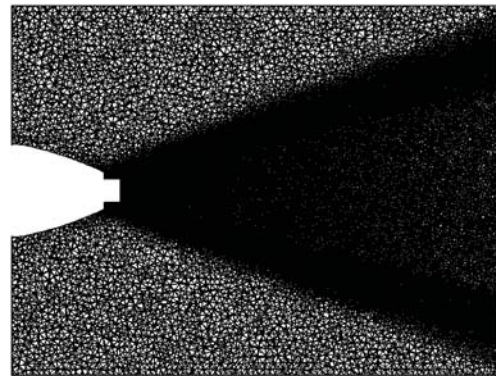
- Valider le modèle FIM-UR avec l'approche Lagrangienne (sans modification de l'injecteur),
- Vérifier que la modification de l'injecteur ne perturbe pas l'injection (approche Lagrangienne),



(a) Maillage "meshEL"



(b) Maillage "meshEE"



(c) Maillage "meshEE_fine"

Figure 4.17: Coupe médiane des différents maillages

- Valider le modèle FIM-UR avec l'approche Eulérienne (avec modification de l'injecteur).

4 Résultats

4.1 Simulations Lagrangiennes

4.1. 1) Cas EL_Mono

On compare ici la simulation EL_Mono avec les mesures de [Yang et al. \(2003\)](#). La Fig. 4.19 propose une comparaison qualitative entre un champ de particules simulé d'une part, et de deux visualisations directes expérimentales d'autre part. L'angle de spray est correctement reproduit.

Les profils radiaux de vitesse axiale liquide sont comparées en Fig 4.20 dans les 6 sections

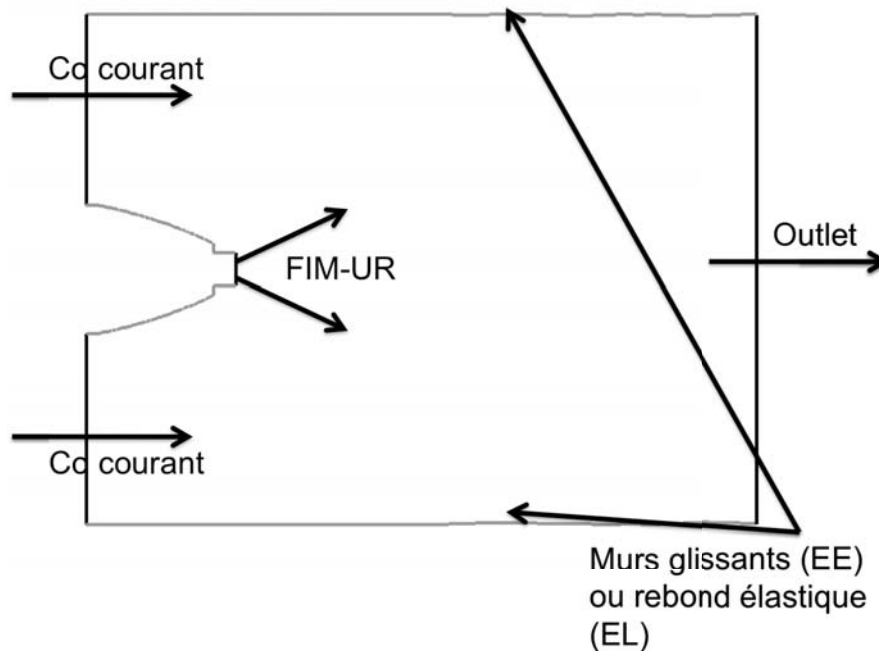


Figure 4.18: Conditions aux limites appliquées dans la configuration de [Yang et al. \(2003\)](#)

choisies par les expérimentateurs. On observe :

- Une amplitude de vitesse correcte en proche injecteur, qui perdure en aval dans la chambre
- L'absence de gouttes au centre du spray dans les simulations
- Une absence de gouttes à la périphérie à partir de $x = 50 \text{ mm}$

Ces différences peuvent s'expliquer par l'hypothèse d'une distribution non monodisperse en sortie d'injecteur.

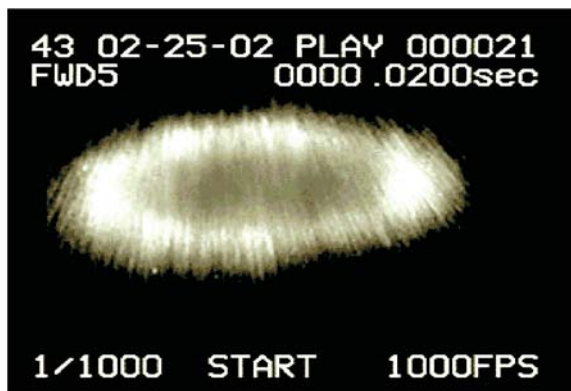
4.1. 2) Cas *EL_Poly*

L'impact d'une distribution polydisperse en sortie d'injecteur est étudié dans cette partie, en comparant les cas *EL_Mono* et *EL_Poly*.

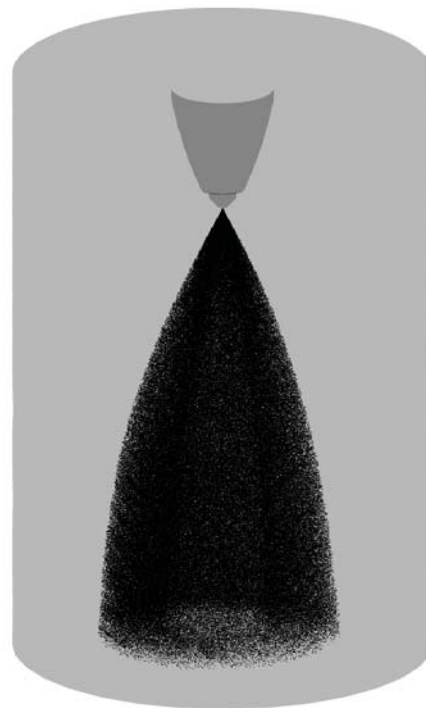
La Fig 4.21 compare la topologie du spray pour les deux cas. Si l'angle de spray proche de l'injecteur est le même dans les deux simulations, la topologie diffère en aval de l'injecteur. Le cône est net dans le cas *EL_Mono*, et creux. Dans le cas *EL_Poly*, les bords du cône sont plus diffus et on observe la présence de gouttes à l'intérieur du cône.



(a)



(b)



(c)

Figure 4.19: Cas EL_Mono. Comparaison qualitative entre des visualisations directes expérimentales latérale (a) et transverse (b), et un champ de particules calculé (c)

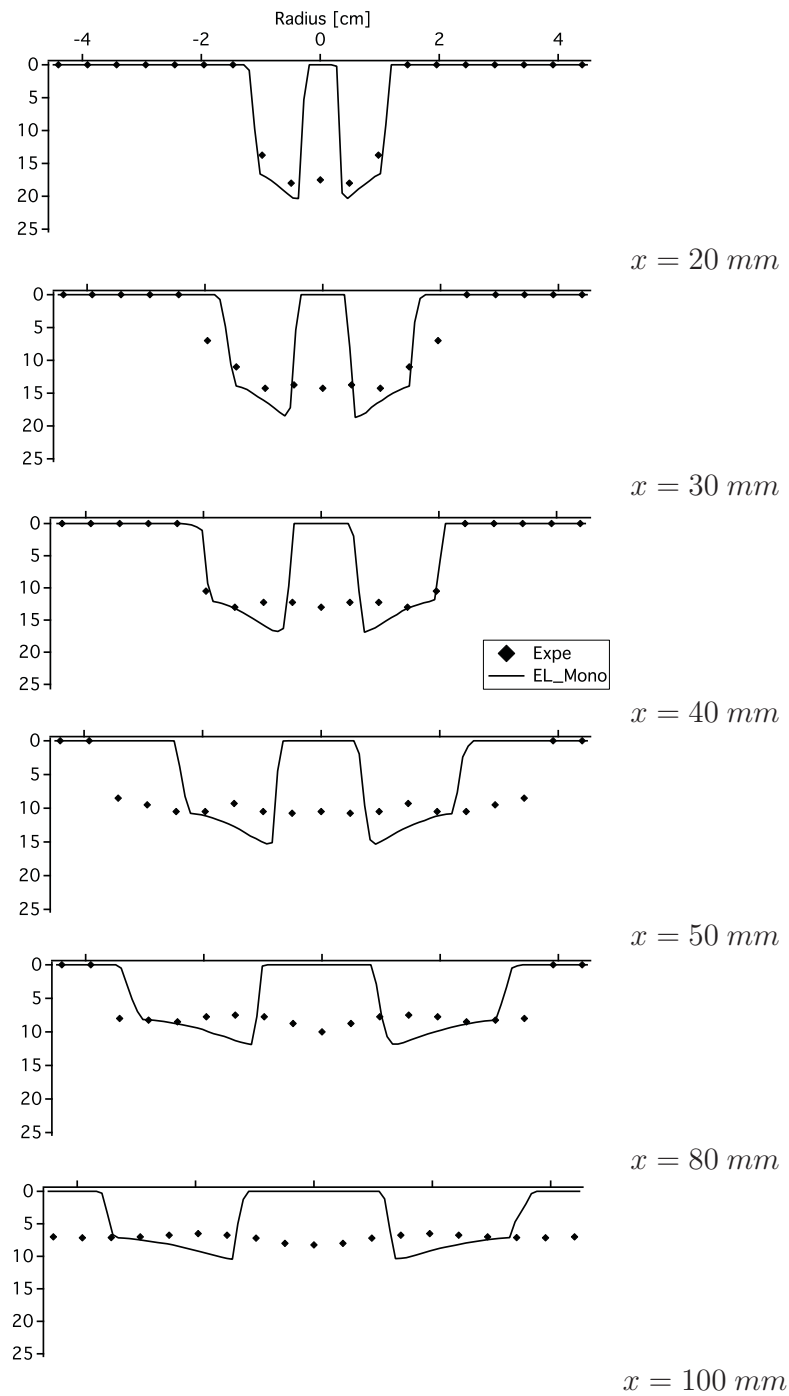


Figure 4.20: Cas EL_Mono. Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; expériences (symboles) et calculs (lignes)

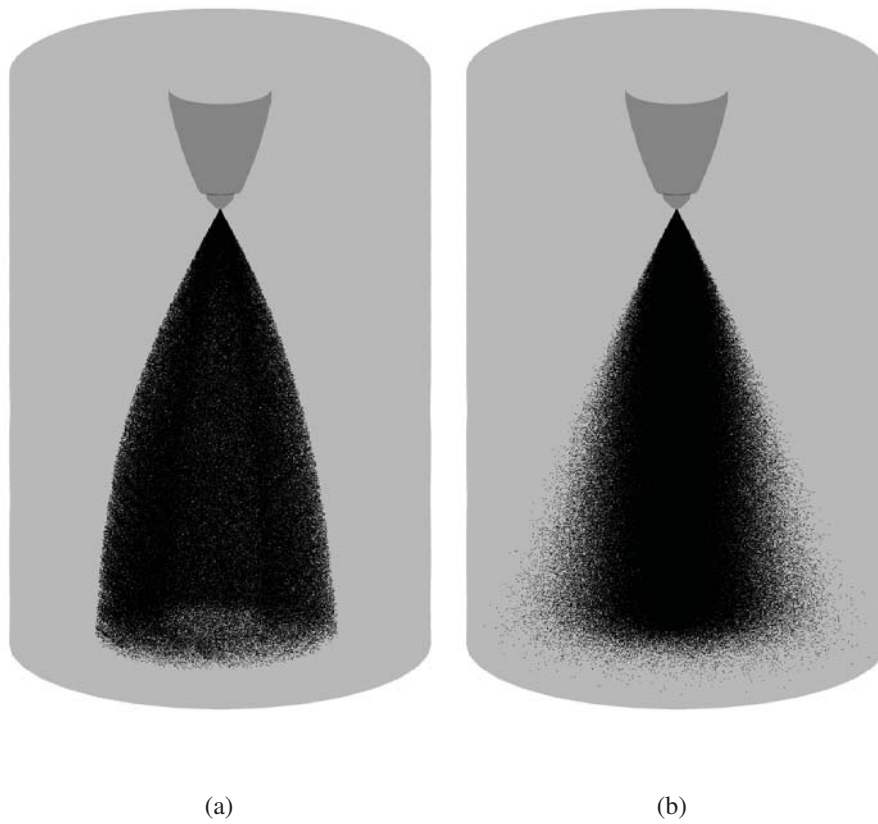


Figure 4.21: Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) Cas EL_Mono (b). Cas EL_Poly

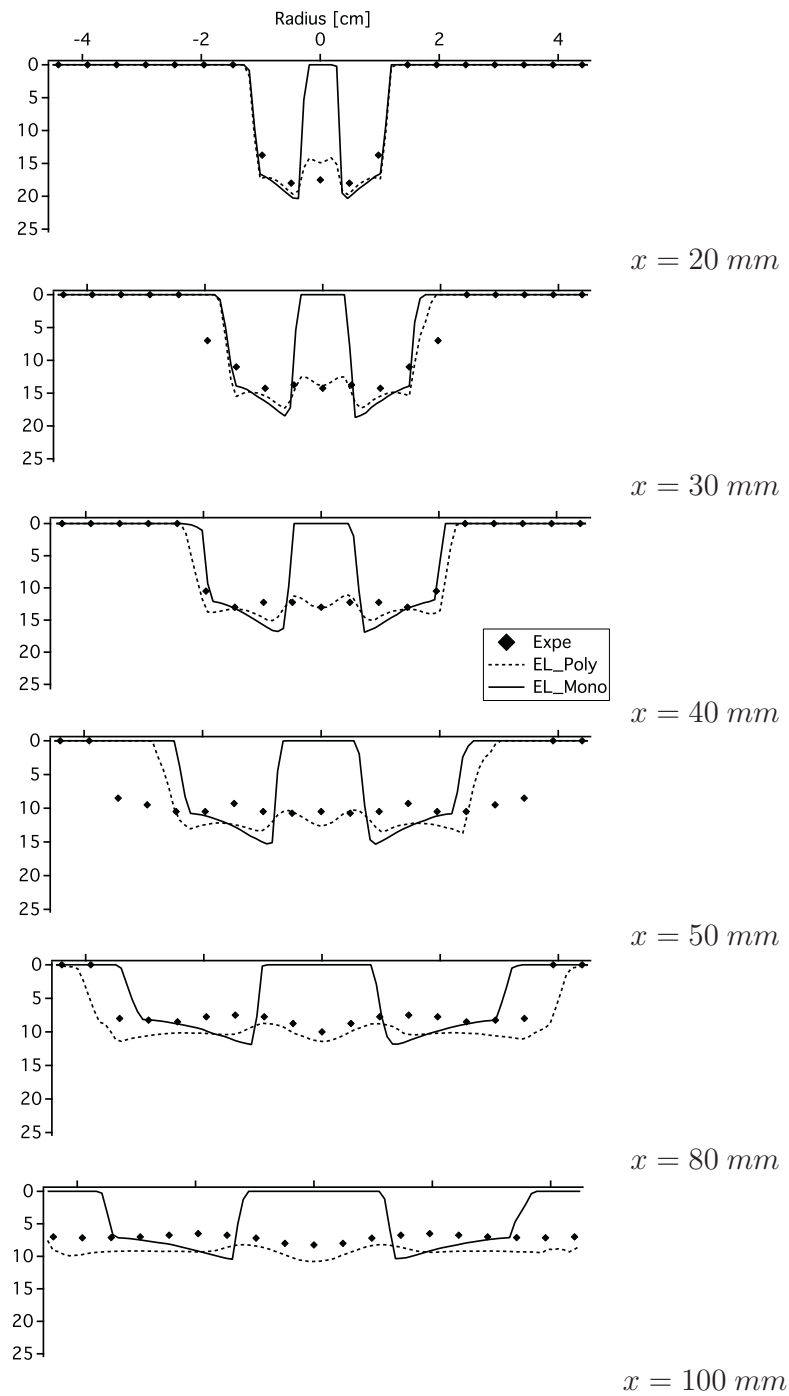


Figure 4.22: Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; expériences (symboles), Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EL_Poly (ligne pointillée)

Les profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions dans la chambre sont comparés dans la Fig 4.22. On observe un bon accord entre le calcul Lagrangien polydisperse et l'expérience. D'une part, la vitesse axiale liquide décroît au fur-et-à-mesure dans la chambre, avec la même amplitude que dans les expériences. On constate néanmoins une légère surestimation dans la deuxième moitié de la chambre. D'autre part, contrairement au cas EL_Mono, on retrouve des gouttes non seulement à l'intérieur du cône principal proche de l'axe, mais également en périphérie du jet à partir de $x = 50 \text{ mm}$ comme dans les expériences. L'objectif dans la suite de cette analyse est de caractériser la structure polydisperse de ce jet liquide.

La Figure 4.23 représente un champ instantané d'indicateur de détection des particules. Cet indice prend la valeur zéro lorsque les gouttes sont absentes d'une cellule, et la valeur unitaire si au moins une goutte est détectée dans la cellule. On constate des gouttes partout à l'intérieur du cône, donnant à une injection conique creuse une structure conique pleine, en nombre de particules.

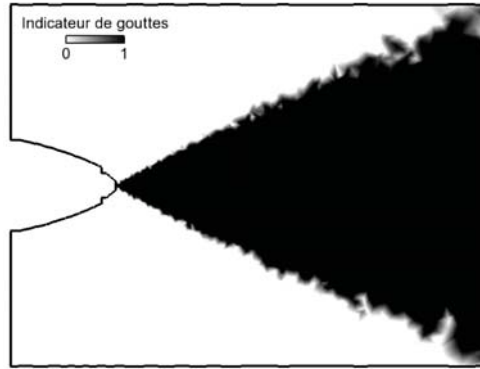


Figure 4.23: Cas EL_Poly. Champ instantané du paramètre indicateur de particules dans le plan médian du domaine de calcul

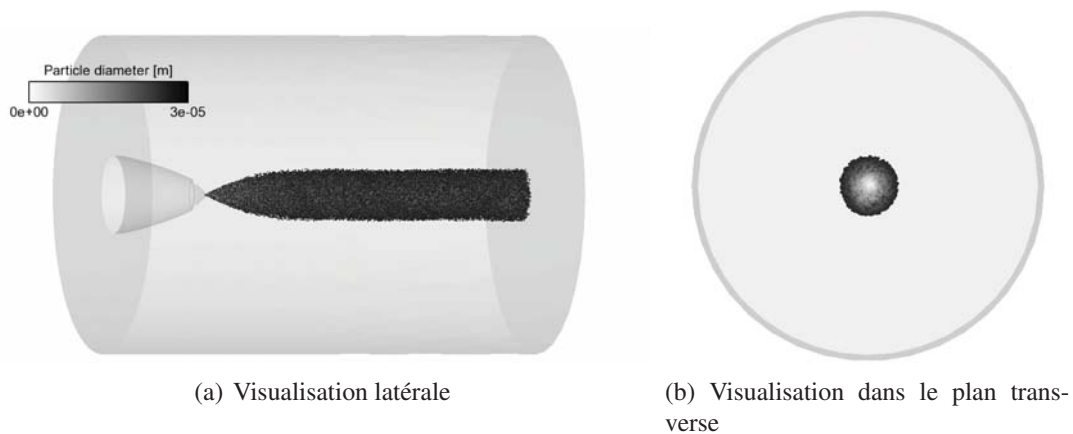


Figure 4.24: Cas EL_Poly. Visualisation de la classe I (entre $0 \mu\text{m}$ et $30 \mu\text{m}$)

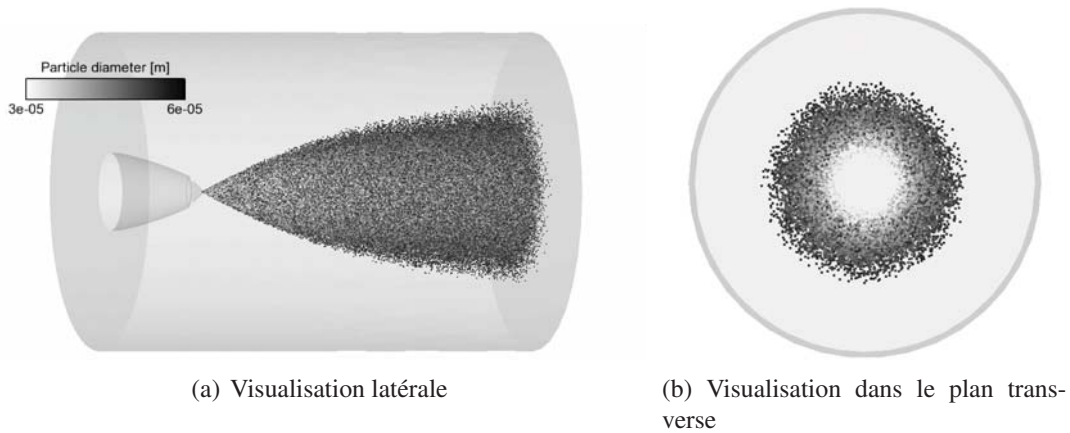


Figure 4.25: Cas EL_Poly. Visualisation de la classe II (entre $30\ \mu m$ et $60\ \mu m$)

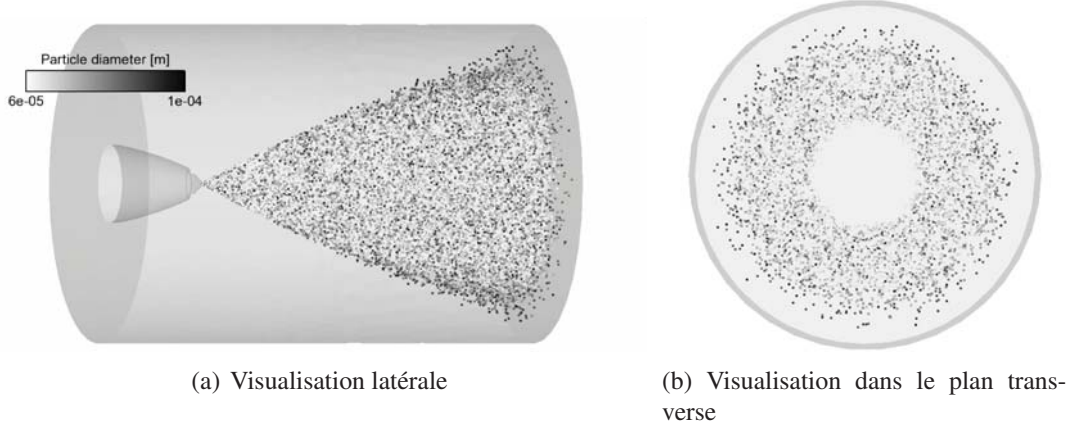


Figure 4.26: Cas EL_Poly. Visualisation de la classe III (supérieures à $60\ \mu m$)

Pour analyser la structure du jet liquide en fonction du diamètre des particules, on décompose la distribution en tailles représentée en Fig 4.15 en trois classes :

- la classe I comprend les gouttes de faibles diamètres (entre 0 et $30\ \mu m$) ;
- la classe II englobe les gouttes de diamètres moyens (entre 30 et $60\ \mu m$) ;
- la classe III représente les gouttes de grands diamètres (supérieurs à $60\ \mu m$).

Les Figures 4.24–4.26 (a) et 4.24–4.26 (b) représentent les champs de gouttes pour les trois classes dans des vues latérale et perpendiculaire au jet respectivement. On observe trois comportements différents :

- Les gouttes appartenant à la classe I restent confinées proches de l'axe, du fait de leur faible inertie, et sont convectées par le gaz jusqu'à la sortie de la chambre. Elles contribuent

	Numérique	Volumique
Classe I	28.7 %	3 %
Classe II	55.1 %	43 %
Classe III	16.2 %	54%

Table 4.8: Cas EL_Poly. Pourcentage numérique et volumique des différentes classes

donc au remplissage de la zone "creuse" du jet. On constate pour cette classe I une forte ségrégation, l'axe étant presque vide de particules tandis que la périphérie est remplie de gouttes les plus grosses ($30\ \mu m$) dans cette classe (Fig. 4.26 (b)). Ce sont ces gouttes qui sont responsables de la vitesse axiale liquide proche de l'axe constatée en Fig 4.22.

- Les gouttes de taille moyenne (classe II) forment, proche de l'injecteur un cône autour du demi-angle d'injection $\theta_s = 30$, leur pénétration radiale étant bien plus importante que celle des gouttes de la classe I. En aval de l'injecteur du fait du couplage avec le gaz, on observe une réduction de l'angle. Par ailleurs, on remarque l'absence de gouttes dans la zone centrale (Fig. 4.25 (b)). C'est la structure de cette classe qui est la plus proche du jet monodisperse (cas EL_Mono).
- Finalement, les gouttes de grand diamètre (classe III) ont une grande inertie et sont peu soumises à l'effet de la traînée. En effet, quelle que soit leur position dans la chambre, les gouttes de classe III forment toujours un angle proche de celui à l'injection. Ces gouttes possèdent les vitesses radiales les plus importantes, ce qui les projette en périphérie du jet. Les gouttes de la classe III sont responsables des grandes vitesses axiales en périphérie de jet dans la deuxième moitié de la chambre constatée en Fig 4.22.

Ainsi, on constate une forte disparité de comportement au sein même d'un spray conique swirlé polydisperse : les gouttes de tailles intermédiaire et grande participent à la création du cône et à son maintien loin de l'injection, tandis que les petites gouttes participent au remplissage de la zone creuse interne. Le modèle FIM-UR polydisperse permet donc de reproduire les principales caractéristiques d'une injection swirlée pressurisée, qui n'est pas un cône creux si l'on considère le nombre de particules. Néanmoins en volume, ce spray est creux comme l'indique le tableau 4.8, qui compare les contributions en nombre et en volume des trois classes. Les gouttes de la classe I ont un poids conséquent dans la distribution numérique (presque un tiers), mais un poids très faible en volume. Les deux autres classes représentent la majeure partie du spray en volume (97%), la classe II représentant près de la moitié en nombre. Les Figures 4.27–4.29 permettent de quantifier la contribution des trois classes aux profils radiaux de vitesse axiale moyenne, confirmant les observations précédentes.

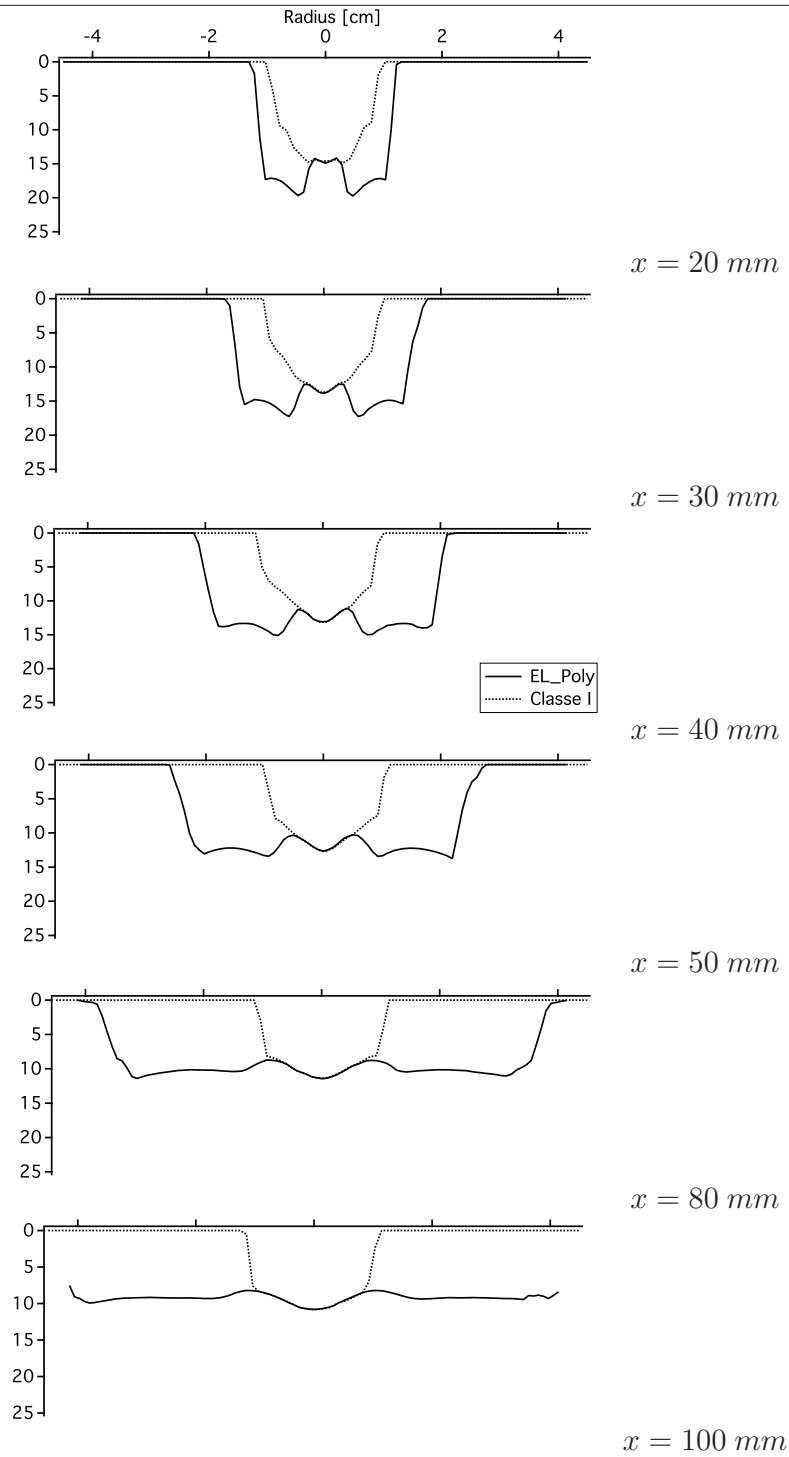


Figure 4.27: Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe I du cas EL_Poly (ligne pointillée)

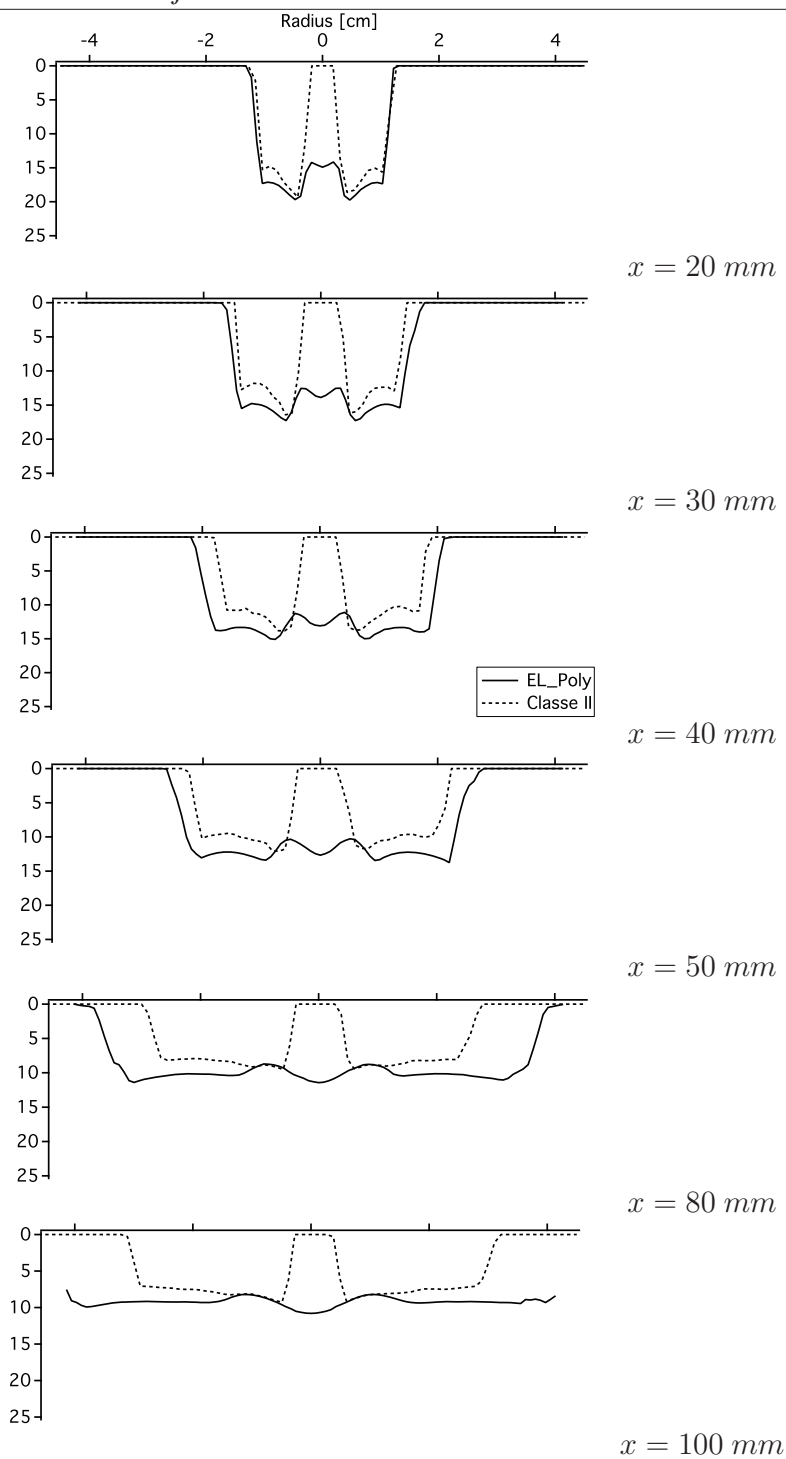


Figure 4.28: Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe II du cas EL_Poly (ligne pointillée)

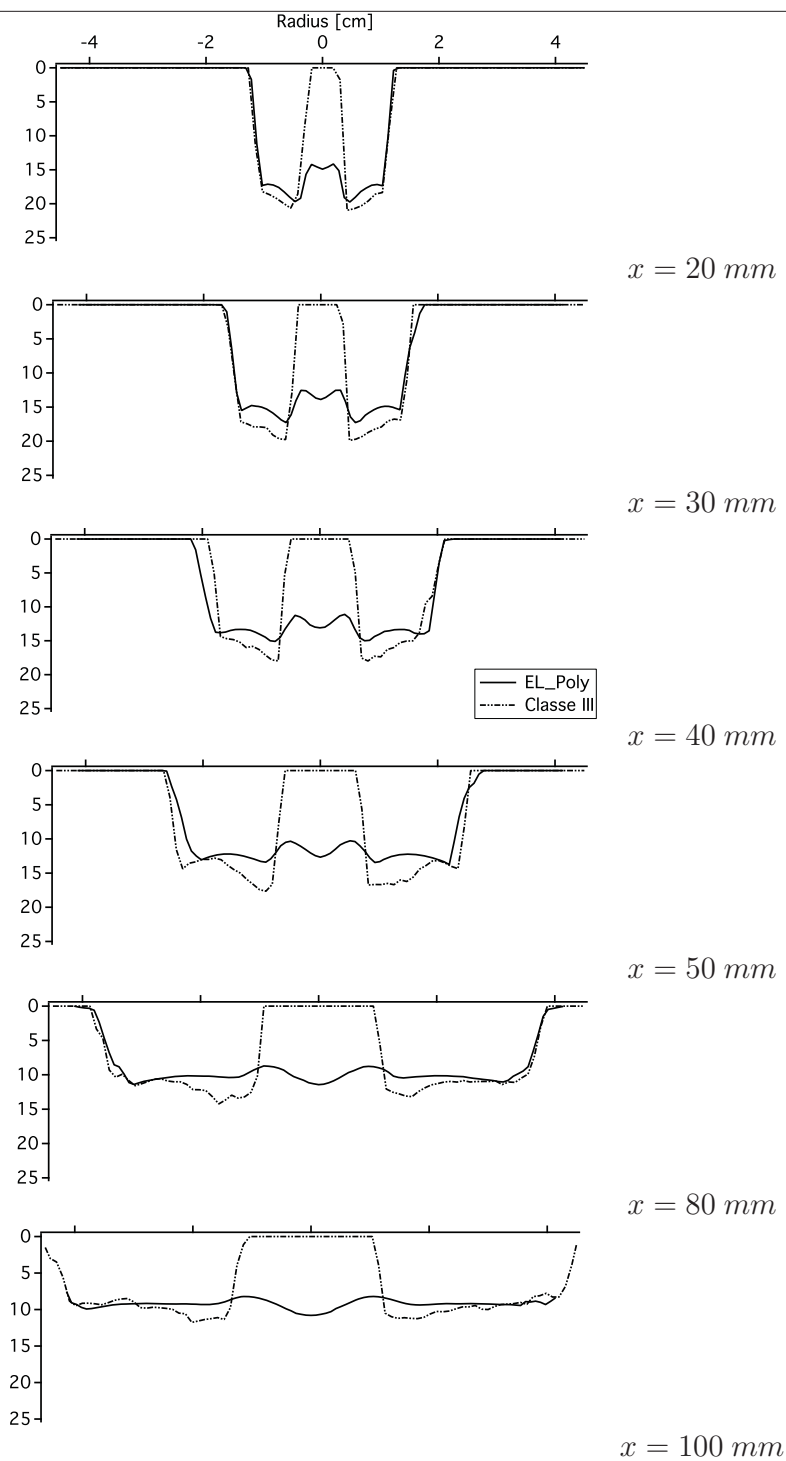


Figure 4.29: Cas EL_Poly. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : Cas EL_Poly (ligne continue), Classe III du cas EL_Poly (ligne pointillée)

4.1. 3) Cas EL_Mono_mesh_EE

L'objectif dans la suite de cette analyse est de comparer les approches monodisperses Lagrangienne et Eulérienne. La première étape consiste à vérifier que la modification géométrique introduite sur le maillage meshEE n'a pas d'impact sur la description du jet liquide. On compare donc les cas EL_Mono et EL_Mono_on_meshEE qui ne diffèrent que par le maillage utilisé (respectivement meshEL et meshEE), l'approche Lagrangienne monodisperse étant utilisée.

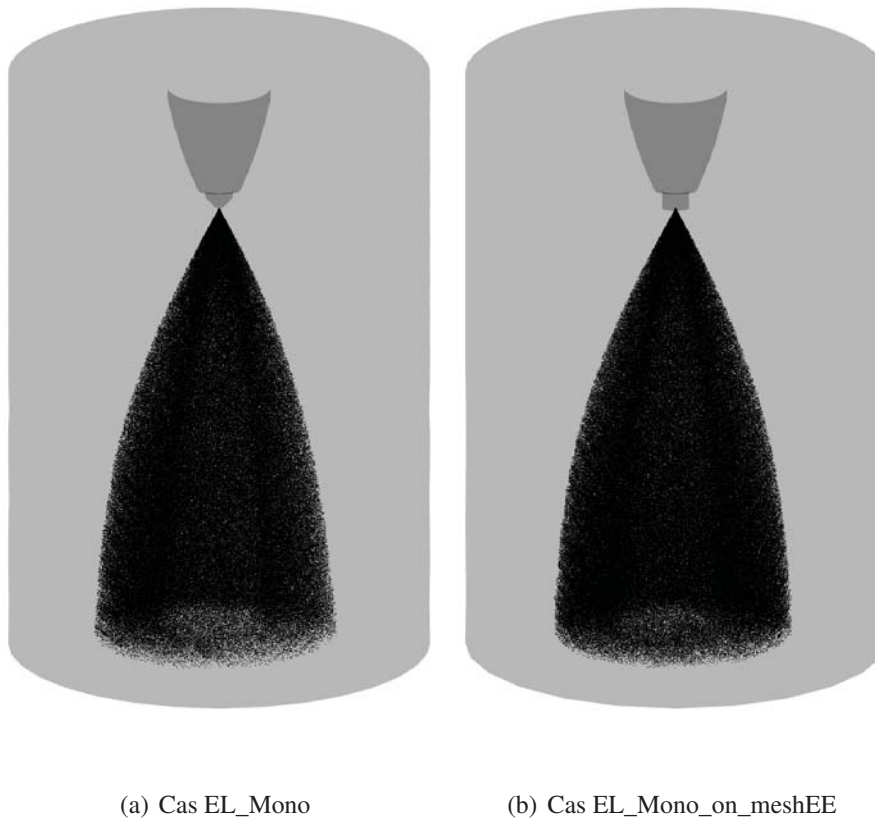


Figure 4.30: Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) Cas EL_Mono (b) Cas EL_Mono_on_meshEE

La Fig 4.30 donne une comparaison qualitative de la topologie des sprays pour les cas cas EL_Mono et EL_Mono_on_meshEE. Les deux champs sont très similaires. Ceci est confirmé par la comparaison quantitative des profils de vitesse axiale liquide en Fig. 4.31. Les profils derrière l'injecteur sont très proches, confirmant la possibilité d'apporter cette modification géométrique

sans impacter le jet. On note cependant des différences dans la deuxième moitié de la chambre qui semblent difficiles à expliquer, la résolution étant la même dans cette zone. Ces différences ne portent pas à conséquence, ni pour l'analyse des simulations Eulériennes dans ce cas laminaire, ni pour les calculs dans la chambre turbulente MERCATO, l'écoulement turbulent modifiant considérablement le jet en aval de l'injection.

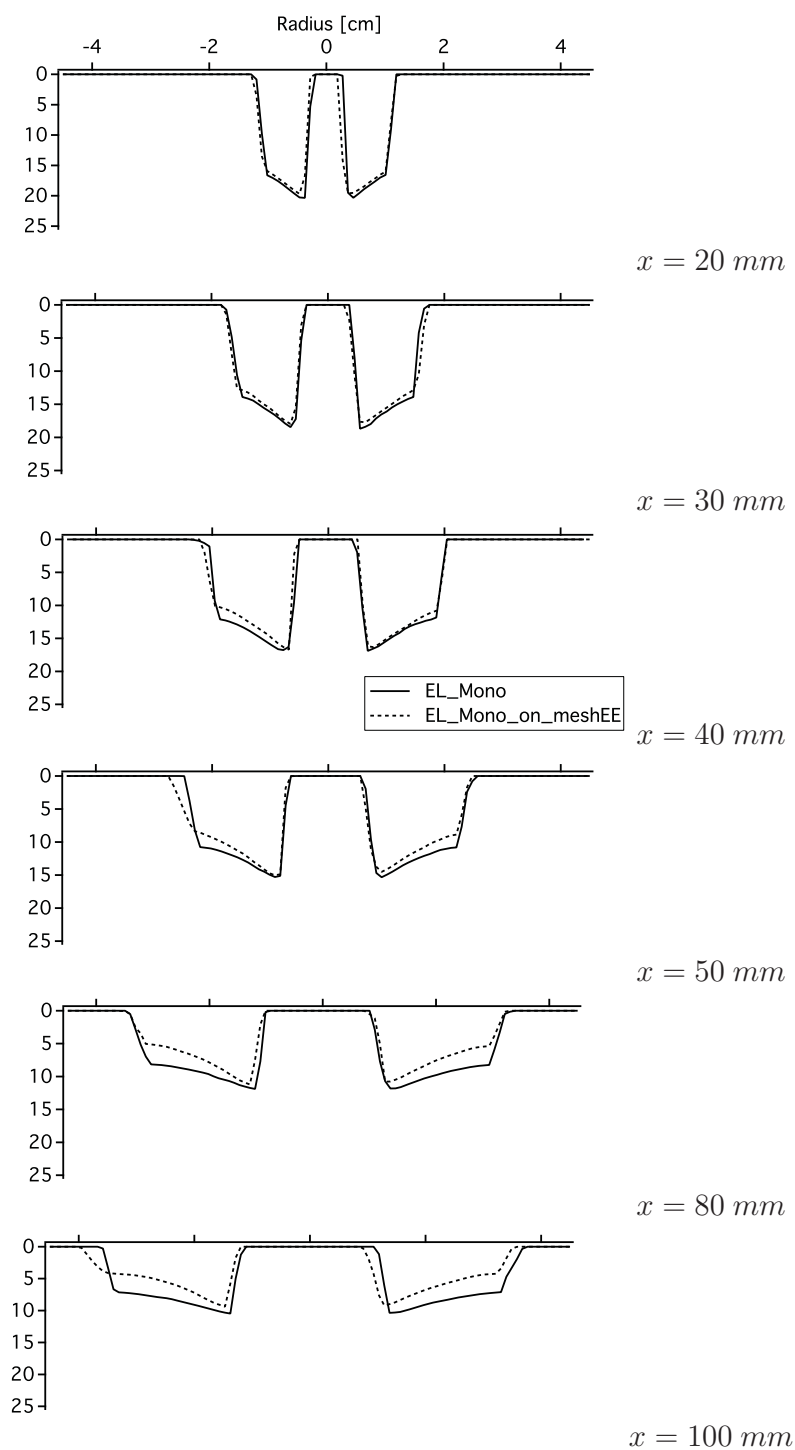


Figure 4.31: Comparaison des profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions ; Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EL_Mono_on_meshEE (ligne pointillée)

4.2 Simulations Eulériennes

Le formalisme Eulérien mésoscopique étant un formalisme continu, les profils de vitesse sont à associer avec des profils de flux axial liquide, défini comme étant le produit de la fraction volumique liquide et de la masse volumique du liquide par la vitesse axiale liquide. Ainsi, si des zones de fraction volumique faible donnent une vitesse, ils sont à associer avec une zone vide de particules, mise en évidence par le flux axial liquide.

4.2. 1) Cas EE

L'impact de la modification géométrique étant faible en aval de l'injecteur, l'objectif est à présent d'analyser les calculs Eulériens. Dans un premier temps, le cas EE calculé sur le meshEE est analysé. Le modèle original de [Sanjosé et al. \(2011\)](#) est utilisé dans cette partie.

La Figure 4.32 compare qualitativement les topologies expérimentale et numérique du spray. On retrouve une structure de cône creux avec un demi-angle de spray d'environ 30° comme dans les expériences.

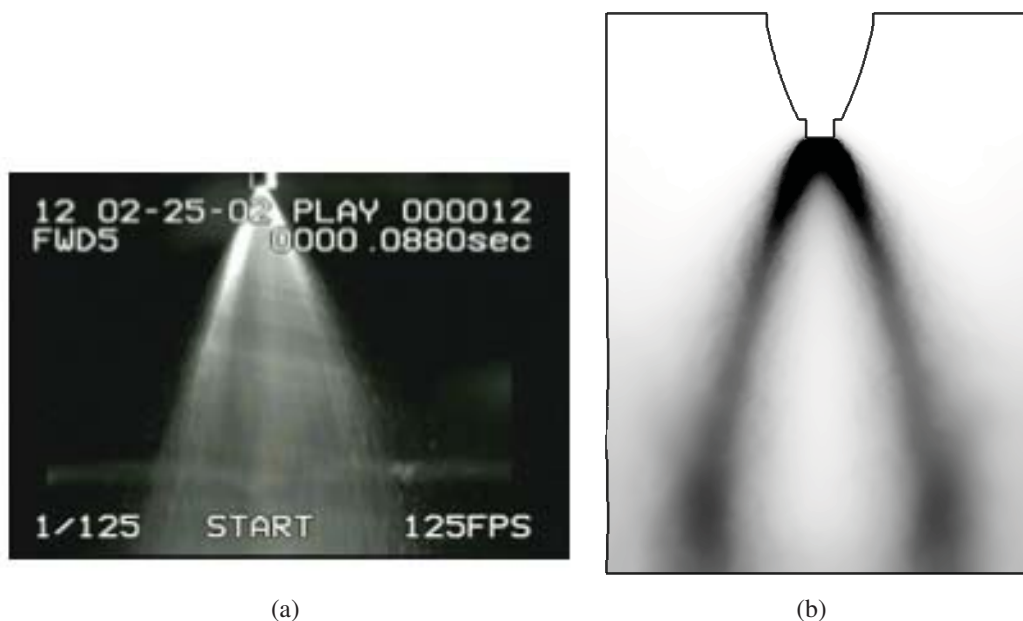


Figure 4.32: Cas EE. Comparaison qualitative des topologies de sprays : (a) visualisation directe expérimentale et (b) fraction volumique liquide dans le plan médian

Les profils radiaux de vitesse axiale liquides sont comparés à l'expérience en Fig. 4.33. Les résultats du cas EL_Mono sont ajoutés, permettant également une comparaison entre les deux

formalismes. Tout d'abord, on n'observe pas de cône creux proche de l'axe pour le cas EE, le formalisme Eulérien donnant une vitesse en chaque point. On note un bon accord en proche injection, mais une amplitude de vitesse plus faible dans le cas EE que dans les expériences et dans le cas EL_Mono plus en aval de l'injecteur. Ces différences en deuxième moitié de chambre sont principalement dues à une résolution moins grande dans cette partie de la chambre, comme le montre la suite de cette analyse. L'évolution du flux axial liquide représente bien un cône (Fig. 4.34). La présence de gouttes au centre du cône est induite par un effet de diffusion lié au maillage.

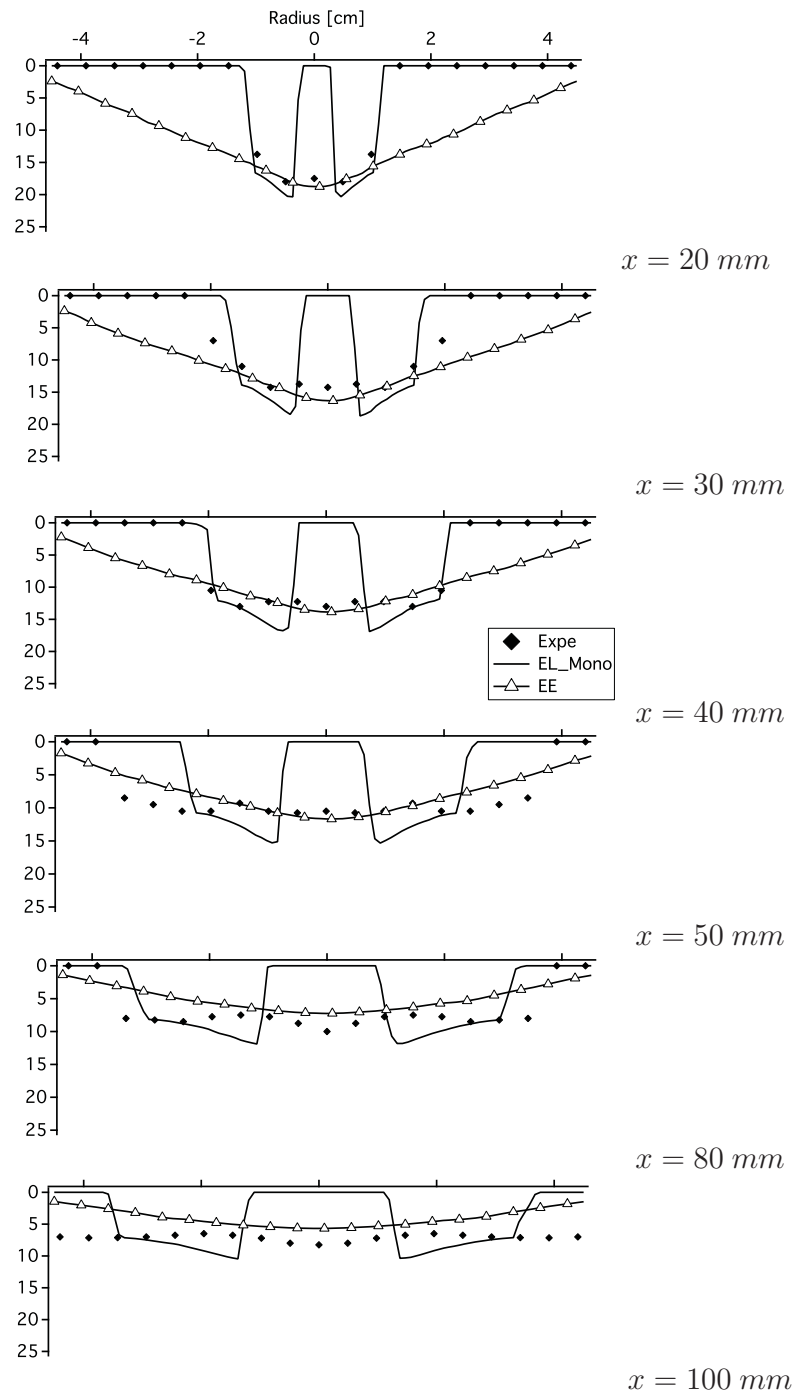


Figure 4.33: Cas EE. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EL_Mono (ligne continue) et Cas EE (ligne continue et symboles blancs)

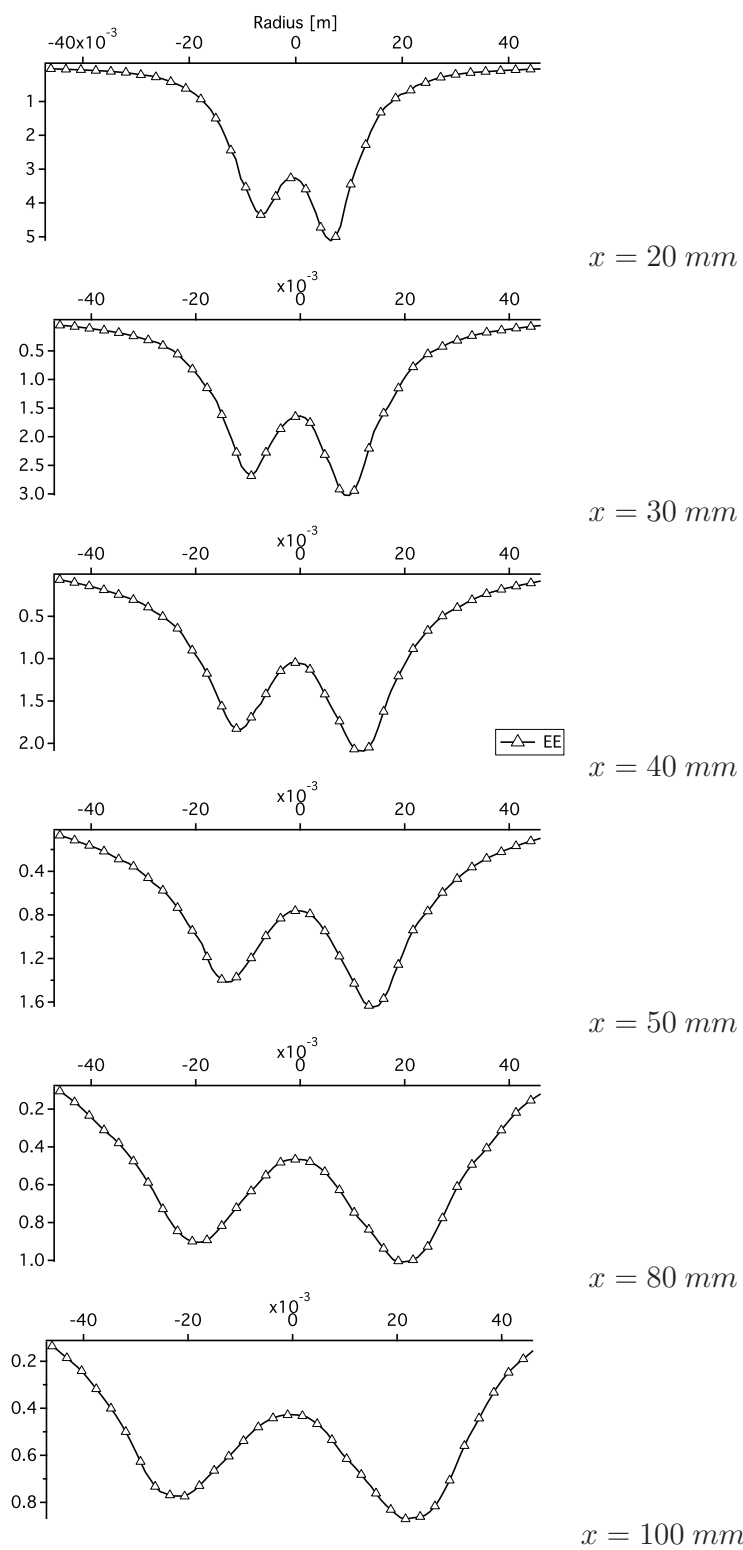


Figure 4.34: Cas EE. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur

4.2. 2) Cas EE_fine

Afin de montrer l'effet de la résolution du maillage sur les résultats Eulériens, le maillage meshEE_fine est à présent utilisé, pour lequel la résolution est augmentée non seulement loin de l'injection mais également proche de l'injecteur. Le modèle d'origine de [Sanjosé et al. \(2011\)](#) est encore utilisé.

La Figure 4.35 compare le cas EE_fine avec le cas EE et les expériences en termes de profils radiaux de vitesse axiale avec l'expérience. Si les amplitudes de vitesse liquide augmentent avec la résolution dans la deuxième moitié de la chambre, elles augmentent également en proche injection. La diffusion liée au maillage en proche injection permet donc une meilleure adéquation entre les expériences et le modèle de [Sanjosé et al. \(2011\)](#). L'accord avec les expériences est donc globalement moins bon que dans le cas EE bien que la structure du jet reste correctement reproduite, et la structure en cône creux est bien retrouvée (Fig. 4.36)

4.2. 3) Cas EE_fine_mod

La dernière étape consiste à évaluer l'impact des modifications apportées dans ce travail au modèle FIM-UR pour le formalisme Eulérien. Le modèle FIM-UR_mod est à présent comparé au modèle de [Sanjosé et al. \(2011\)](#) sur le maillage meshEE_fine. La Figure 4.37 compare les profils radiaux de vitesses axiales pour les cas EE_fine et EE_fine_mod avec l'expérience. On observe tout le long de la chambre des profils de même forme mais une amplitude inférieure de 2 à 3 m/s pour le cas EE_fine_mod comparé au cas EE_fine, améliorant de manière non négligeable les comparaisons avec l'expérience. Le modèle est toujours capable de reconstruire une structure de cône creux (Fig. 4.38).

5 Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle d'injection FIM-UR a été évalué dans une configuration d'injection dans un écoulement laminaire, alors qu'il n'avait été validé que dans des cas turbulents jusqu'alors. Des améliorations du modèle pour le formalisme Eulérien ont été proposées. L'impact de la polydispersion dans ce type d'écoulement a également été évalué avec l'analyse de calculs Lagrangiens polydisperses.

Les calculs Lagrangiens montrent une bonne dynamique du spray en termes d'angle d'ouverture et d'amplitude de vitesse liquide axiale. La prise en compte d'une injection polydisperse, contrairement à l'injection monodisperse, permet de reproduire plus fidèlement le spray, avec la prise en compte de petites gouttes qui restent confinées proche de l'axe d'injection et des grosses gouttes qui se trouvent en périphérie du spray. Une analyse du calcul par classes permet de mettre en évidence ces différents comportements.

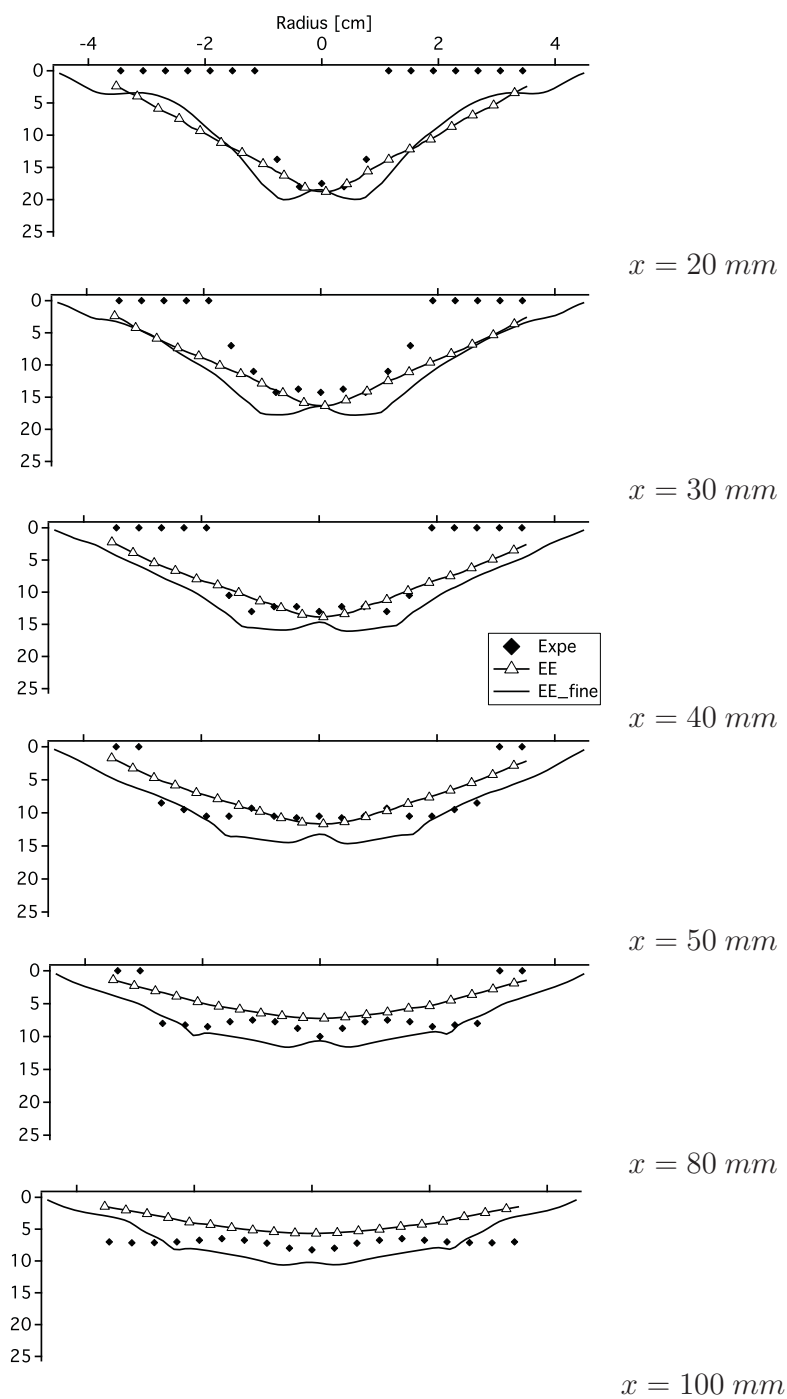


Figure 4.35: Cas EE_fine. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EE (ligne continue et symboles blancs) et Cas EE_fine (ligne continue)

L'impact de la modification géométrique en proche injecteur nécessaire à la mise en oeuvre de calculs Eulériens dans ce type de configuration a été analysé à l'aide de calculs Lagrangiens, montrant qu'elle est négligeable dans ces calculs d'injection.

Enfin, les calculs Eulériens ont d'une part montré l'amélioration sensible des résultats apportées par les modifications du modèle de [Sanjosé et al. \(2011\)](#) et d'autre part l'effet non négligeable de la résolution du maillage sur la qualité des résultats. Ce résultat sera pris en compte lors de l'élaboration du maillage du banc turbulent MERCATO (chapitre [6](#)).

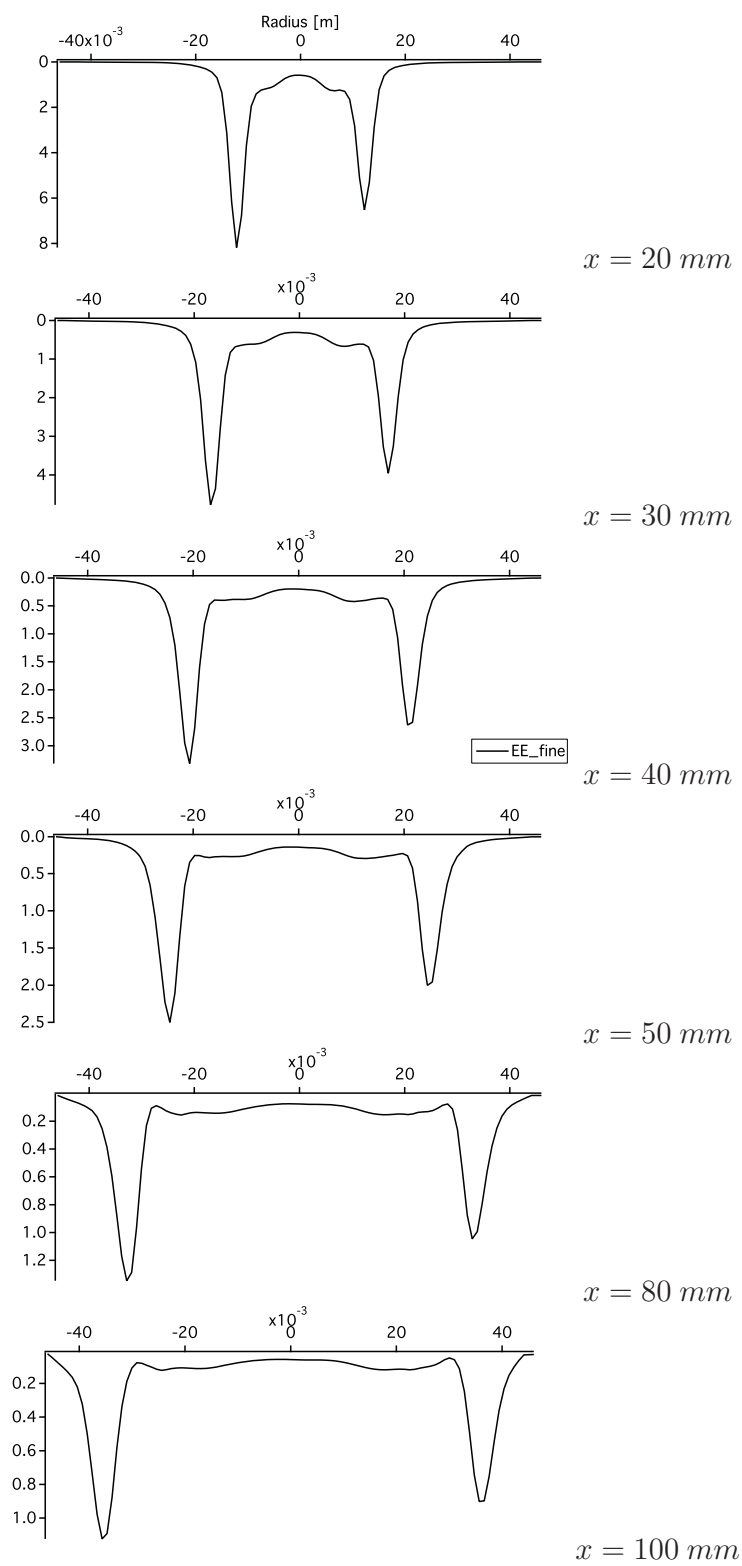


Figure 4.36: Cas EE_fine. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur

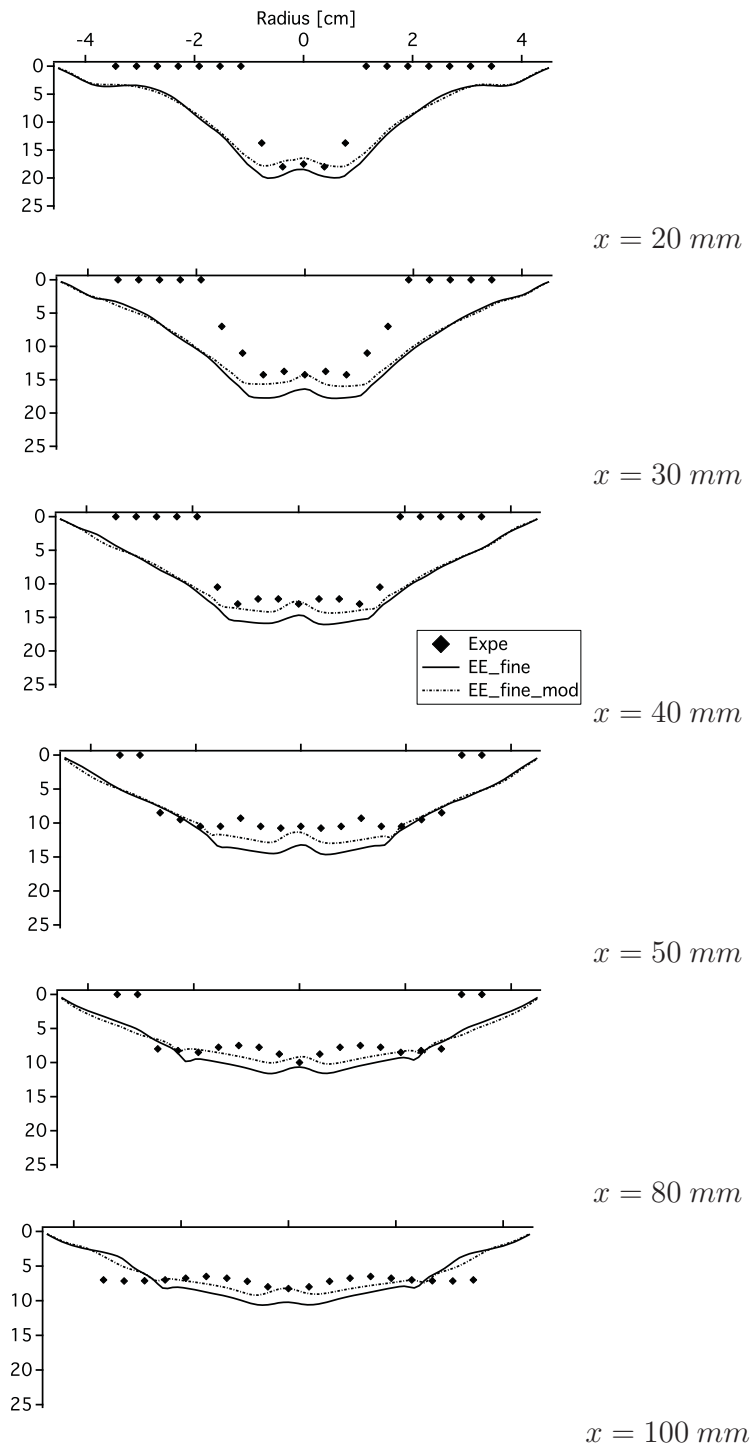


Figure 4.37: Cas EE_fine_mod. Profils radiaux de vitesse axiale liquide à différentes positions de l'injecteur : expériences (symboles noirs), Cas EE_fine (ligne continue) et Cas EE_fine_mod (ligne pointillée)

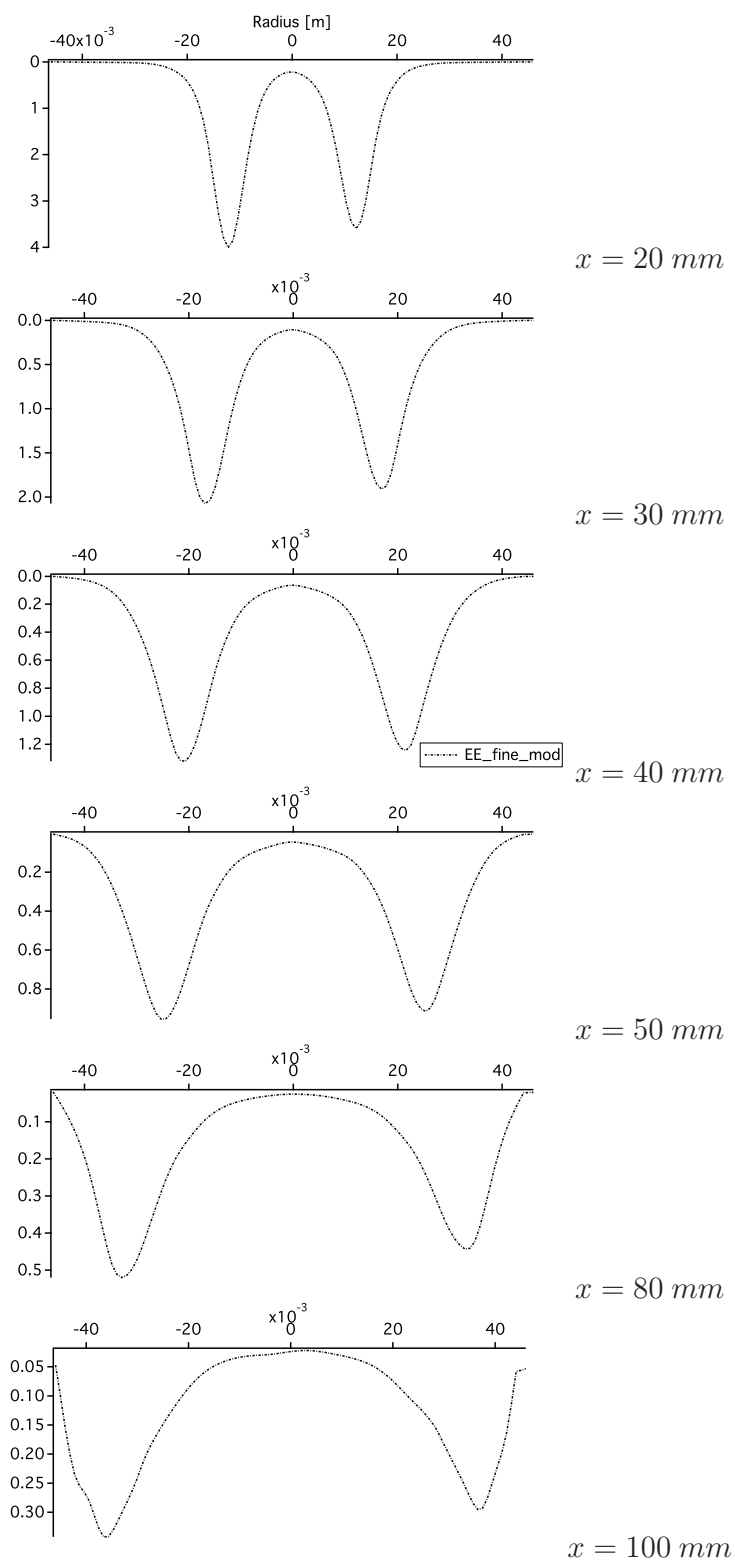


Figure 4.38: Cas EE_fine_mod. Profils radiaux de flux axial liquide à différentes positions de l'injecteur

Chapitre 5

Impact de la polydispersion sur la dynamique et l'évaporation des sprays

Sommaire

1	Définition des diamètres caractéristiques d'un spray	141
2	La Turbulence Homogène Isotrope	143
2.1	Généralités	143
2.2	Analyse dans l'espace spectral	144
2.3	Initialisation de l'écoulement gazeux en THI	147
3	Validation sur un cas de référence monodisperse	148
3.1	Cas de référence	149
3.2	Nombre de Stokes et concentration préférentielle	149
3.3	Résultats	150
4	THI chargées en particules avec différentes distributions de taille	151
4.1	Méthodologie	151
4.2	Choix des diamètres de gouttes et cas simulés	152
5	Résultats sur la dynamique	154
5.1	Ségrégation	154
5.2	Force de traînée	160
6	Evaporation d'un spray pour différentes distributions de taille	163
6.1	Méthodologie	163
6.2	Diamètres issus de la littérature des lits fluidisés	163
6.3	Cas simulés	165
6.4	Résultats	165
7	Conclusion	167

Le mélange, la dispersion et l'évaporation des particules dans un écoulement turbulent sont des sujets importants, d'un point de vue académique, mais aussi d'un point de vue industriel, puisque la structure d'un écoulement diphasique va fortement contrôler les phénomènes d'allumage et de combustion. Le plus souvent, la distribution de taille de gouttes est polydisperse, et donc la dynamique de la phase diluée et son évaporation sont contrôlées par un large éventail de temps caractéristiques différents. La dispersion est un problème rencontré dans de nombreuses situations : procédés, transports d'allergènes, polluants, traceurs radioactifs transportés par les vents et courants à l'échelle de notre planète. De nombreuses études ont donc porté sur ce phénomène (Tchen (1947); Maxey (1982)). La dynamique des particules a surtout été étudiée dans des écoulements gazeux turbulents bien définis, à savoir dans des cas de Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules (Snyder and Lumley (1971); Riley and Paterson (1974)). En 1990, Squires and Eaton (1991c) mettent en évidence le phénomène de ségrégation préférentielle des particules (Maxey (1987); Wang et al. (2000); Février (2000)) : les particules s'agglutinent dans des zones de faible vorticit  et de forts cisaillements.

Comme la dispersion des gouttes, l'évaporation d'un spray polydisperse est aussi li e   la taille des gouttes qui introduisent des temps d' vaporation diff rents. Ainsi, dans les cas o   une approche polydisperse n'est pas possible, le choix du diam tre moyen est aujourd'hui d licat.

Le comportement d'un spray polydisperse en termes de dynamique et d' vaporation va donc  tre  tudi  dans ce chapitre. L'objectif est d' valuer d'une part l'importance de l'effet de la polydispersion et d'autre part dans quelle mesure un spray polydisperse peut  tre mod lis  par un spray monodisperse. Pour  tudier la dynamique, des calculs de Turbulence Homog ne Isotrope charg e en particules vont  tre effectu s, en comparant l' volution de la phase dispers e pour une distribution polydisperse,   celle de distributions monodisperses   diff rents diam tres moyens. L' volution de la masse  vapor e des sprays est, elle,  tudi e, dans un gaz au repos. Ce chapitre s'organise ainsi :

Dispersion :

- Rappel des diff rents diam tres moyens commun ment utilis s dans la litt rature
- Rappel sur la Turbulence Homog ne Isotrope (THI) et initialisation de la solution initiale pour toutes les simulations de THI
- Comparaison avec un cas test de r f rence (Kaufmann et al. (2008a))
- Pr sentation de la m thodologie utilis e, des tailles de gouttes choisies et de l'ensemble des cas simul s
- R sultats sur la dynamique des sprays

Evaporation :

- Pr sentation de la m thodologie et des cas simul s

- Résultats sur l'évaporation des sprays

1 Définition des diamètres caractéristiques d'un spray

A partir d'une distribution connue de gouttes, on peut extraire différents diamètres, qu'on rappelle ici dans les éq 5.2 à éq 5.8. La formule générale est :

$$D_{pq} = \left(\frac{\sum_{k=1}^N D^p}{\sum_{k=1}^N D^q} \right)^{\frac{1}{p-q}} \quad (5.1)$$

C'est le rapport des moments d'ordre p et q de la distribution en diamètre. On obtient :

D_{10}

$$D_{10} = \frac{\sum_{k=1}^N D}{\sum_{k=1}^N 1} = \frac{\sum_{k=1}^N D}{N} \quad (5.2)$$

D_{20}

$$D_{20} = \left(\frac{\sum_{k=1}^N D^2}{\sum_{k=1}^N 1} \right) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^N D^2}{N}} \quad (5.3)$$

D_{21}

$$D_{21} = \frac{\sum_{k=1}^N D^2}{\sum_{k=1}^N D^1} \quad (5.4)$$

D_{30}

$$D_{30} = \left(\frac{\sum_{k=1}^N D^3}{\sum_{k=1}^N 1} \right) = \left(\frac{\sum_{k=1}^N D^3}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.5)$$

D_{31}

$$D_{31} = \left(\frac{\sum_{k=1}^N D^3}{\sum_{k=1}^N D} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.6)$$

D_{32}

$$D_{32} = \frac{\sum_{k=1}^N D^3}{\sum_{k=1}^N D^2} \quad (5.7)$$

D_{43}

$$D_{43} = \frac{\sum_{k=1}^N D^4}{\sum_{k=1}^N D^3} \quad (5.8)$$

p	q	p+q	Symbole	Nom	Utilisation
1	0	1	D_{10}	Longueur	Comparaisons directes avec les expériences
2	0	2	D_{20}	Surface	Phénomènes en surface
3	0	3	D_{30}	Volume	Phénomènes en volume
2	1	3	D_{21}	Surface-longueur	Absorption (optique)
3	1	4	D_{31}	Volume-longueur	Evaporation
3	2	5	D_{32}	Sauter (SMD)	Transfert de masse, réaction
4	3	7	D_{43}	De Brouckere ou Herdan	Combustion

Table 5.1: Les différents diamètres moyens et leur utilisation d'après Lefebvre (1989b)

Chacun des diamètres définis dans les éq. 5.2 à 5.8 a un sens particulier (table 5.1 (Lefebvre (1989b))), et le choix du diamètre dans un calcul monodisperse a un impact sur le résultat. Ainsi, selon la physique que l'on souhaite étudier, le choix du diamètre moyen peut varier. Par exemple le D_{20} (ou le D_{30}) est la quantité à choisir si l'objectif est d'étudier un phénomène dépendant de la même surface (ou du même volume) des gouttes. Le D_{32} et le D_{43} sont utilisés en combustion. Le D_{32} est souvent accessible dans les expériences et associe les caractéristiques du volume et de la surface des gouttes.

Pour caractériser la dynamique, on va effectuer des simulations de THI chargée en particules et comparer les résultats pour différentes distributions de taille. Dans un premier temps, une solution turbulente des équations de Navier Stokes est générée, à partir d'un spectre de Passot-Pouquet. Cette solution va être la solution initiale de toutes nos simulations de Turbulence Homogène Isotrope. Après validation des résultats pour un spray monodisperse par comparaison de la concentration préférentielle et de la décroissance de l'énergie cinétique turbulente à un cas de référence, on effectue des simulations pour une distribution polydisperse Rosin-Rammler, et pour un ensemble de distributions monodisperses qui balaye la gamme de tailles de goutte de la distribution Rosin-Rammler. Des simulations supplémentaires monodisperses sont effectuées pour tous les diamètres moyens (D_{ij}). Les résultats sont analysés en termes de ségrégation, traînée moyenne et traînée réduite moyenne.

La caractérisation de la distribution de taille sur l'évaporation n'étant pas liée à l'écoulement, des simulations 0D de spray évaporant dans un milieu inerte sont réalisées pour des distributions monodisperses et polydisperse.

2 La Turbulence Homogène Isotrope

2.1 Généralités

La turbulence d'un écoulement est d'abord caractérisée par le nombre de Reynolds Re défini ainsi :

$$Re = \frac{u_f l_f}{\nu} \quad (5.9)$$

où u_f et l_f sont la vitesse caractéristique et la longueur caractéristique de l'écoulement gazeux et ν est la viscosité cinématique du fluide.

Plus ce nombre de Reynolds est élevé, plus l'écoulement est turbulent. L'état transitoire entre laminaire et turbulent est souvent difficile à déterminer, dépendant de l'écoulement lui-même, de la géométrie, et de l'état des parois. Par exemple, la transition vers la turbulence dans un conduit apparaît pour un nombre de Reynolds proche de 2300 (Pope (2000)). La turbulence est caractérisée par des grandeurs qui fluctuent au cours du temps et de l'espace, et nécessite une description statistique. On introduit ainsi la notion de moyenne d'ensemble, et on décompose chaque variable en moyenne et fluctuation :

$$U = \bar{U} + u, \quad \text{avec } \bar{u} = 0 \quad (5.10)$$

où $\bar{\cdot}$ est l'opérateur de moyenne. Depuis Dryden and Kueth (1930), l'intensité des fluctuations de turbulence est caractérisée par la variance de la variable fluctuante (RMS en anglais) :

$$u' = \sqrt{\overline{u^2}} \quad (5.11)$$

On peut alors définir un nombre de Reynolds turbulent, caractéristique de l'intensité turbulente :

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (5.12)$$

où l_t est une échelle caractéristique de la turbulence (généralement l'échelle intégrale).

On introduit aussi un temps caractéristique de turbulence :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u'} \quad (5.13)$$

La théorie de la cascade énergétique (Richardson (1922)) implique le transfert de l'énergie des grandes structures tourbillonnaires vers les plus petites, où cette énergie est dissipée par frottement visqueux. La dissipation ε est évaluée à partir des données relatives aux tourbillons de grande taille (Chassaing (2000)) :

$$\varepsilon = \frac{u'^2}{l_t} \quad (5.14)$$

mais cette dissipation s'effectue dans les petites échelles, ce qui donne aussi :

$$\varepsilon = \frac{u_k'^2}{\eta_k} \quad (5.15)$$

où u_k' est la fluctuation de vitesse associée à la plus petite échelle η_k (échelle de Kolmogorov). A cette échelle, le nombre de Reynolds vaut 1 (Chassaing (2000)) :

$$Re_k = \frac{u_k' \eta_k}{\nu} = 1 \quad (5.16)$$

La longueur de Kolmogorov, ainsi que la vitesse et le temps caractéristique associés à cette échelle, sont liés à la dissipation par :

$$\eta_k \equiv (\nu^3/\varepsilon)^{1/4} \quad (5.17)$$

$$u_k' \equiv (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad (5.18)$$

$$\tau_k \equiv (\nu/\varepsilon)^{1/2} \quad (5.19)$$

En utilisant les éqs. 5.12, 5.14, 5.15 et 5.16, on obtient les rapports entre échelle intégrale et échelle de Kolmogorov, en termes de longueur, vitesse fluctuante et temps caractéristique :

$$\frac{l_t}{\eta_k} = Re_t^{\frac{3}{4}} \quad (5.20)$$

$$\frac{u'}{u_k'} = Re_t^{\frac{1}{4}} \quad (5.21)$$

$$\frac{\tau_t}{\tau_k} = Re_t^{\frac{1}{2}} \quad (5.22)$$

$$(5.23)$$

Tous ces rapports sont des puissances de Re_t , ce qui implique que plus Re_t est grand, plus la gamme d'échelles turbulentes est grande.

2.2 Analyse dans l'espace spectral

Dans l'espace spectral, après transformation de Fourier, un nombre d'onde k est associé à chaque échelle de longueur l , par $k = 2\pi/l$ (Hinze (1987)). L'énergie est représentée par un spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k, t)$, comme une fonction du nombre d'onde et du temps. Son évolution temporelle est décrite par :

$$\frac{\partial}{\partial t} E(k, t) = T_g(k, t) - 2\nu k^2 E(k, t) \quad (5.24)$$

où $T_g(k, t)$ est un terme exprimant le transfert d'énergie entre les différentes échelles de l'écoulement. Son intégrale sur l'espace spectral est nulle. L'intégration de cette équation entre zéro et l'infini, donne l'équation de l'évolution de l'énergie cinétique turbulente q_g^2 :

$$\frac{Dq_g^2}{Dt} = -\varepsilon \quad (5.25)$$

et l'équation de l'évolution de la dissipation ε est :

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = -C_\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{q_g^2} \quad (5.26)$$

avec

$$q_g^2 = \int_0^\infty E(k, t) dk \quad (5.27)$$

et

$$\varepsilon = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k, t) dk \quad (5.28)$$

Une solution de THI décroissante est donnée par :

$$\tau_\varepsilon = \tau_{\varepsilon_0} \left[1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon_0}} \right] \quad (5.29)$$

$$q_g^2 = q_{g,0}^2 \left[1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon_0}} \right]^{-\frac{1}{C_\varepsilon - 1}} \quad (5.30)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left[1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon_0}} \right]^{-\frac{C_\varepsilon}{C_\varepsilon - 1}} \quad (5.31)$$

où $\tau_\varepsilon = q_g^2/\varepsilon$ et C_ε est une constante fixée expérimentalement ($C_\varepsilon = 1.92$).

Dans AVBP, deux formes de spectre turbulent peuvent être utilisées afin d'initialiser l'écoulement : les spectres de Passot-Pouquet, et de Von Karman-Pao.

- **Le spectre de Passot-Pouquet (Passot and Pouquet (1987)) (PP)**

$$E(k) = A \left(\frac{k}{k_e} \right)^4 \exp^{-2(k/k_e)^2} \quad \text{avec } A = 16 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u_g'^2}{k_e} \quad (5.32)$$

A est l'amplitude du spectre, et $k_e = 2\pi/l_e$ le nombre d'onde correspondant à l'échelle la plus énergétique. Ce spectre analytique ne donne pas d'importance aux petites échelles. L'essentiel de l'énergie se situe autour de la valeur k_e . En particulier, il omet la zone inertielle où se produit la cascade énergétique. L'initialisation d'un calcul avec un spectre de Passot-Pouquet est donc loin d'une solution des équations de Navier-Stokes, et il est nécessaire de reconstruire cette dernière par simulation avant d'étudier l'écoulement.

- **Le spectre de Von Kármán rectifié par Pao (1965, 1968) (VKP)**

Ce spectre permet de définir la plupart des échelles de turbulence, les plus grandes comme les plus petites, et est de la forme :

$$E(k) = \frac{Au_g'^5}{\varepsilon} \frac{\left(\frac{k}{k_e}\right)^4}{\left(1 + \left(\frac{k}{k_e}\right)^2\right)^{17/6}} \exp\left(-\frac{3}{2}\gamma\left(\frac{k}{k_d}\right)^{4/3}\right) \quad (5.33)$$

avec A et γ égaux à 1.5. Dans ce cas, k_d et k_e représentent les nombres d'onde les plus dissipatif et énergétique respectivement.

Une comparaison des spectres analytiques de Passot-Pouquet et de Von Kármán Pao est donnée en Fig. 5.1.

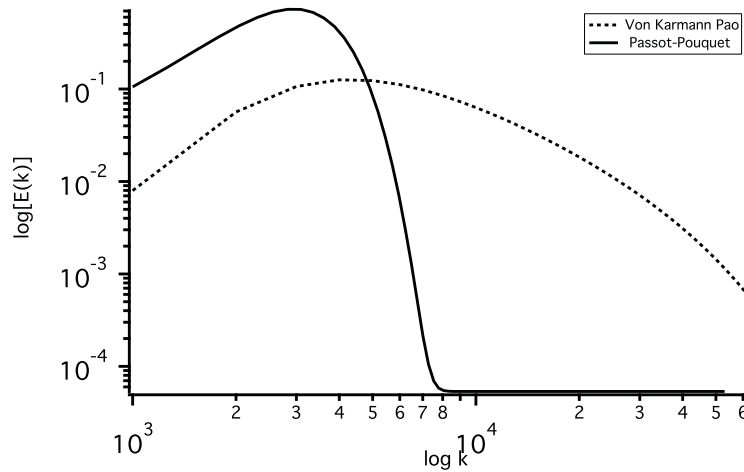


Figure 5.1: Comparaison des spectres de Passot-Pouquet et Von Karmann Pao

D'après Boughanem and Trouvé (1996), le spectre de VKP n'est valide que pour des nombres de Reynolds turbulents supérieurs à 200, au-dessus de ceux considérés dans cette étude. De ce fait, notre choix s'est porté sur le spectre de Passot-Pouquet.

2.3 Initialisation de l'écoulement gazeux en THI

2.3. 1) Maillages utilisés et paramètres numériques

Le maillage utilisé est un maillage cubique, $2\pi \text{ mm} \times 2\pi \text{ mm} \times 2\pi \text{ mm}$, maillé uniformément par des hexahèdres. Deux résolutions ont été testées : 64^3 et 128^3 , correspondant à une taille de maille de $\Delta x = 98.1719 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ et $49.08 \cdot 10^{-6} \text{ m}$. La périodicité est imposée dans toutes les directions. Les caractéristiques des maillages sont résumées dans les tableaux 5.2 et 5.3.

N° de dimensions	3
N° de noeuds	274 625
N° de cellules	262 144
Type d'éléments	Hexahèdres
Longueur du domaine (m)	$2\pi \cdot 10^{-3}$
Taille de maille (m)	$98.1719 \cdot 10^{-6}$

Table 5.2: Paramètres du maillage grossier pour les simulations THI

N° de dimensions	3
N° de noeuds	2 146 689
N° de cellules	2 097 152
Type d'éléments	Hexahèdres
Longueur de domaine (m)	$2\pi \cdot 10^{-3}$
Taille de maille (m)	$49.08 \cdot 10^{-6}$

Table 5.3: Paramètres du maillage fin pour les simulations THI

Dans toutes les simulations, le schéma utilisé est le schéma TTGC (Colin and Rudgyard (2000)), sans ajout de dissipation artificielle.

2.3. 2) Caractéristiques de l'initialisation

A $t = 0 \text{ s}$, un champ de vitesse est initialisé à partir d'un spectre de Passot Pouquet (éq. (5.32)). Les paramètres du spectre sont les suivants : $l_e = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ et $u'_g = 34.8 \text{ m/s}$. Le nombre de Reynolds turbulent (éq. (5.12)) est $Re_t = 13.32$. Cette simulation est effectuée à condition atmosphérique ($T = 300 \text{ K}$ et $P = 1 \text{ atm}$) et avec une viscosité cinématique $\nu_g = 1.72355 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

On effectue alors un calcul d'environ $t_0 = 12.5 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ (environ $2\tau_k$) de temps physique afin que les petites échelles de turbulence initialement absentes du spectre Passot-Pouquet s'installent, pour obtenir une solution des équations de Navier-Stokes.

2.3. 3) Solution obtenue

La Figure 5.2 compare différents spectres : en trait plein, le spectre analytique, en marqueur noir, le spectre initial calculé, en pointillés, après $12.5 \mu\text{s}$ de simulation. La différence entre le spectre analytique et le spectre initial calculé sur le maillage est due à la discrétisation. La qualité du

spectre à $t = t_0$ est clairement améliorée, comparée au spectre initial notamment aux grands nombres d'onde, c'est-à-dire aux échelles les plus petites.

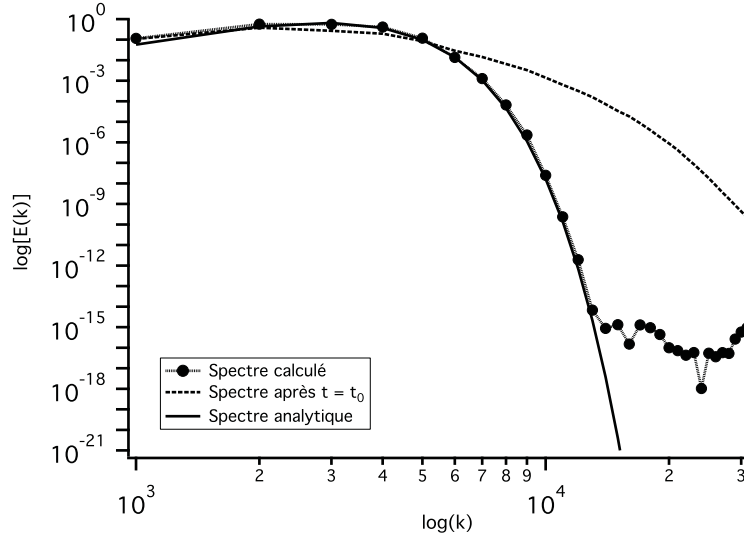


Figure 5.2: Spectres d'énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse : en trait plein, spectre analytique; en marqueur noir, spectre de la solution initiale calculée; en pointillés, spectre obtenu après $t_0 = 12.5 \cdot 10^{-5} s$

Un récapitulatif des paramètres définissant le spectre de Passot-Pouquet initial, et caractérisant le spectre obtenu après mise en place de l'écoulement à $t = t_0$ est présenté dans le Tableau 5.4.

t	q_g^2 (m ² /s ²)	u' (m/s)	ε (m ² /s ³)	τ_t (s)	τ_k (s)
0	1816.56	34.45	$6.38 \cdot 10^7$	$2.84 \cdot 10^{-5}$	$0.52 \cdot 10^{-5}$
t_0	1094	27.01	$5.4 \cdot 10^7$	$1.34 \cdot 10^{-5}$	$0.563 \cdot 10^{-5}$

Table 5.4: Comparaison des grandeurs caractéristiques de la phase gazeuse initiale et à $t_0 = 12.5 \cdot 10^{-5} s$.

La solution obtenue à $t = t_0$ est utilisée comme solution initiale pour toutes les simulations de THI chargée en particules présentées dans ce chapitre.

3 Validation sur un cas de référence monodisperse

A $t = t_0$, on ajoute des gouttes uniformément réparties à la solution générée précédemment et on impose $u_p = u_f$. On compare alors l'évolution de l'énergie cinétique turbulente et de la concen-

tration préférentielle avec les résultats d'un calcul référence réalisé par [Kaufmann et al. \(2008a\)](#).

3.1 Cas de référence

Le cas référence est un calcul en simulation numérique directe avec l'approche Euler/Lagrange extrait des travaux de [Kaufmann et al. \(2008a\)](#) réalisé avec le code NTMIX sur le maillage grossier. Le code NTMIX utilise un schéma d'ordre 6 en espace, et schéma de type Runge-Kutta d'ordre 3 en temps pour la phase gazeuse. Initialement, il y a 40 particules par maille.

Les caractéristiques de la phase liquide sont les suivantes :

Composant	C_2H_{60}
Densité	$\rho_l = 1916 \text{ kg.m}^{-3}$
Diamètre	$d_p = 17.3 \text{ }\mu\text{m}$
Nombre	10.45 millions

Table 5.5: Caractéristique de la phase liquide pour le cas de référence

3.2 Nombre de Stokes et concentration préférentielle

La dynamique des particules dans un milieu gazeux est caractérisée par le nombre de Stokes St . Celui-ci est défini comme le rapport entre un temps de relaxation particulaire τ_p exprimé en éq 3.12 et un temps caractéristique de l'écoulement gazeux. Dans le cas d'un écoulement turbulent, le choix du nombre de Stokes est difficile, du fait des nombreux temps caractéristiques gazeux pertinents. Ici, on a choisi le temps associé aux échelles de Kolmogorov, τ_k (éq 5.19) :

$$St_k = \frac{\tau_p}{\tau_k}$$

Un temps caractéristique lié aux échelles intégrales aurait aussi pu être choisi, mais l'utilisation du τ_k est plus pertinente pour qualifier les effets de concentration préférentielle ([Squires and Eaton \(1990\)](#); [Wang and Maxey \(1993\)](#); [Reynolds \(1995\)](#); [Laviéville et al. \(1995\)](#); [Février et al. \(2001\)](#); [Sommerfeld \(2001\)](#); [Riber \(2007\)](#)).

On définit la ségrégation g_{pp} (appelé aussi concentration préférentielle) :

$$g_{pp} = \frac{\langle \tilde{n}_p^2 \rangle}{\langle \tilde{n}_p \rangle^2} \quad (5.34)$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne un filtre spatial, qu'on assimilera à la taille d'une cellule du maillage. La ségrégation permet de quantifier la dispersion de la phase liquide et est fortement corrélée au

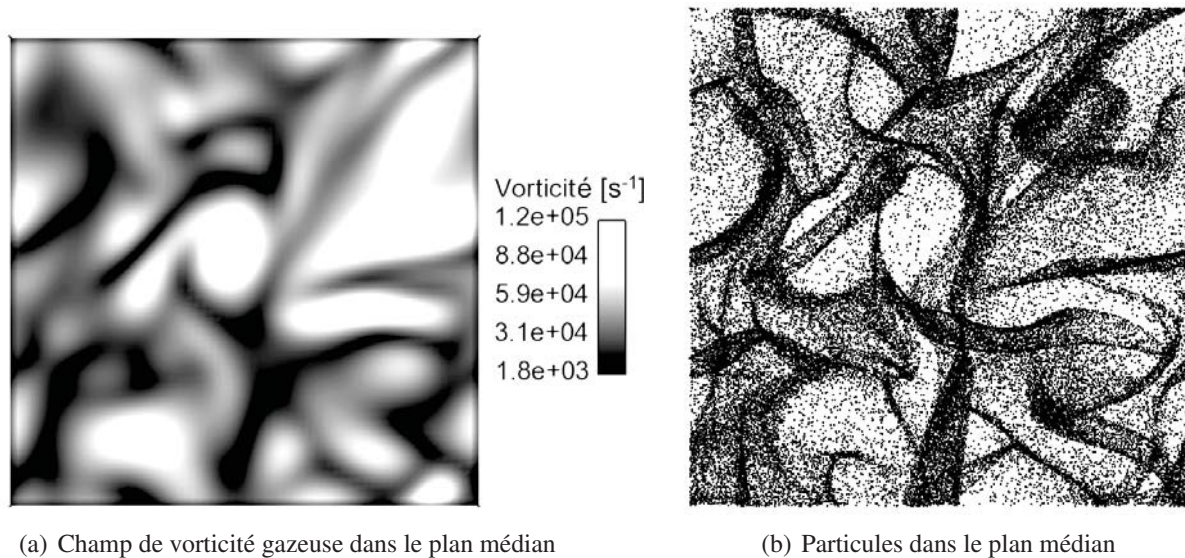


Figure 5.3: THI charg e en particules. Illustration du ph nom ne de concentration pr f rentielle : (a) champ de vorticit  dans le plan m dian ; (b) particules dans le plan m dian

nombre de Stokes. En effet, quand le nombre de Stokes est tr s inf rieur   l'unit , les gouttes ont un comportement de traceur : elles suivent le gaz, l' tat d' quilibre est vite atteint, et la s gr gation reste faible.   l'inverse, quand le nombre de Stokes est sup rieur   l'unit , l'action du gaz sur les particules est bien plus mod r e : les gouttes subissent peu l'effet de la phase porteuse et ont un comportement balistique. L' quilibre est plus long   arriver, et la s gr gation reste l  aussi faible.   la fronti re de ces deux r gimes, dans des gammes de Stokes interm diaires (entre 1 et 10), les gouttes subissent les effets de concentration pr f rentielle, avec une valeur maximale de la s gr gation quand le Stokes vaut 1. La Figure 5.3 illustre ce ph nom ne en comparant un champ de vorticit    un champ de particules, dans le plan m dian du domaine num rique, pour un calcul de THI charg e en particules, effectu e dans cette th se.

Pour une r partition uniforme de gouttes, la s gr gation vaut 1. Au cours du temps, la r partition des gouttes dans l'espace  volue et la s gr gation augmente.

3.3 R sultats

La Figure 5.4 pr sente l' nergie cin tique turbulente et la s gr gation pour le cas r f rence obtenues dans les simulations NTMIX et AVBP (maillage grossier). L'accord sur la phase gazeuse est parfait (Fig 5.4 (a)). En ce qui concerne la s gr gation de la phase liquide, on observe un bon accord jusqu'  $50 \mu\text{s}$ dans la Fig 5.4 (b). Ensuite on remarque une sous-estimation dans le

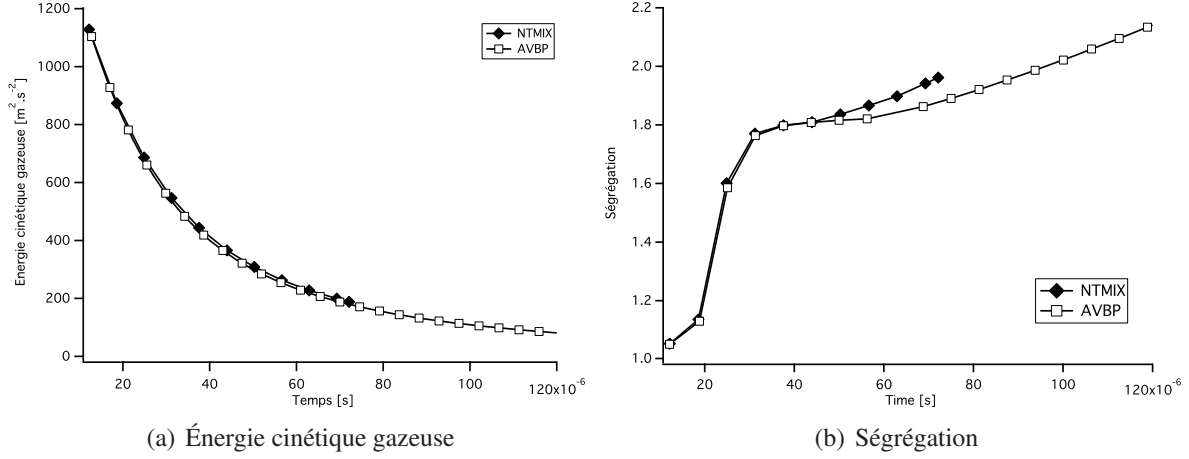


Figure 5.4: Comparaison de l'évolution temporelle de grandeurs obtenue sur le maillage grossier avec NTMIX (marqueurs noirs) et AVBP (marqueurs blancs) : (a) énergie cinétique turbulente, (b) ségrégation

calcul AVBP, due à une convergence statistique plus faible. En effet, le calcul AVBP utilise 5 millions de particules soit environ 20 particules par cellule, alors que dans le cas de référence, on a environ 10,5 millions de particules, c'est-à-dire 40 particules par cellule (Kaufmann et al. (2008a)). Néanmoins, les résultats sont suffisamment proches pour que la méthodologie de calcul avec AVBP soit validée.

4 THI chargées en particules avec différentes distributions de taille

4.1 Méthodologie

On choisit une distribution polydisperse de tailles de gouttes, ainsi que 17 valeurs de diamètre moyen pour les calculs monodisperses. Dans toutes les simulations, la masse volumique d'une particule vaut $\rho_p = 781 \text{ kg/m}^3$ correspondant à celle du kérosène. A $t = t_0$, 5 millions de gouttes sont ajoutées uniformément dans le domaine. Contrairement au cas de référence, la vitesse initiale de chacune des particules dans nos simulations est nulle. Ce choix a été fait car les vitesses initiales entre gouttes et phase gazeuse sont différentes dans des configurations aéronautiques. D'autres simulations ont montré que cette condition initiale sur les vitesses n'a pas d'impact sur les résultats de ce chapitre. Sans influence des particules sur la phase gazeuse, cette dernière évolue de la même façon au cours du temps pour les 18 simulations. On propose de comparer l'évolution de la

ségrégation, de la traînée moyenne, et de la traînée réduite moyenne dans ces 18 simulations.

4.2 Choix des diamètres de gouttes et cas simulés

On choisit une distribution de diamètre de Rosin-Rammler définie en éq. 5.35, avec un diamètre moyen D_{32} de Sauter de $44 \mu m$ et un facteur q valant 2.25 (valeurs communément rencontrées dans nos applications et qui correspondent à la distribution dans le banc MERCATO (chapitre 6)). De cette distribution, on extrait les différents diamètres moyens communément utilisés (de D_{10} à D_{43} , éqs 5.2-5.8), représentés dans la Fig. 5.5 et détaillés dans la table 5.6 (a). De plus, 10 classes de diamètre permettant de balayer l'ensemble des tailles de gouttes ($10 \mu m$ à $100 \mu m$) sont également choisies et sont reportées dans la table 5.6 (b).

$$f(d_p) = q(d_{p,m})^{-q} d_p^{q-1} \exp \left[- \left(\frac{d_p}{d_{p,m}} \right)^q \right] \quad (5.35)$$

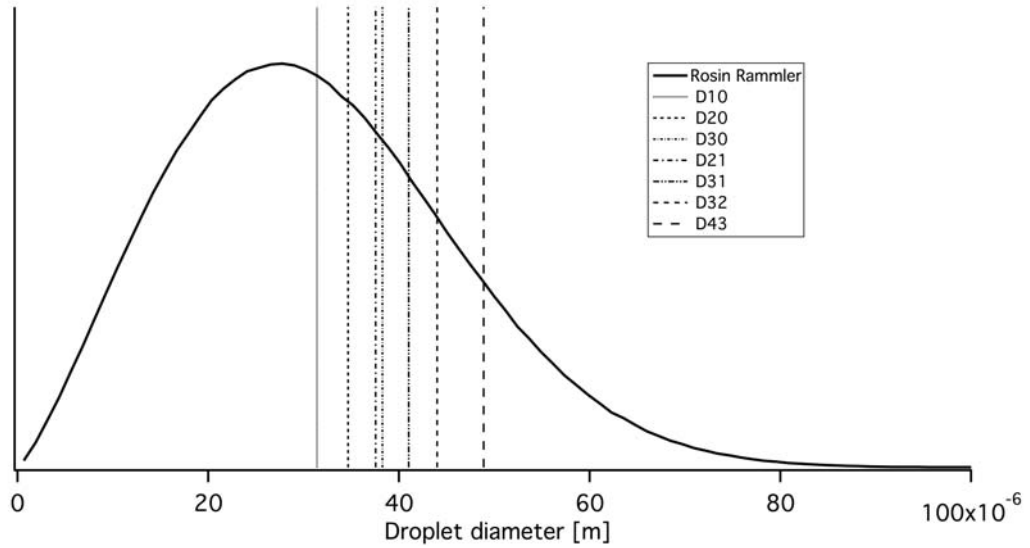


Figure 5.5: Distribution de Rosin-Rammler et diamètres moyens correspondants

L'unique paramètre variant dans ce groupe de simulations est la distribution de diamètres. Par conséquent, les simulations seront nommées en fonction du diamètre initial, et la simulation polydisperse sera nommée *RR*.

Les proportions numériques et massiques des gouttes représentant chaque classe dans la distribution polydisperse sont présentées en Fig. 5.6. La classe prépondérante en nombre est la classe 3

4. THI chargées en particules avec différentes distributions de taille

Nom du cas	D	St_k	Nom du cas	D	St_k
D_{10}	$31.4 \mu m$	3.76	D^1	$10 \mu m$	0.4
D_{20}	$34.65 \mu m$	4.6	D^2	$20 \mu m$	1.52
D_{30}	$37.55 \mu m$	5.4	D^3	$30 \mu m$	3.43
D_{21}	$38.27 \mu m$	5.6	D^4	$40 \mu m$	6.1
D_{31}	$41.02 \mu m$	6.4	D^5	$50 \mu m$	9.54
D_{32}	$44 \mu m$	7.4	D^6	$60 \mu m$	13.7
D_{43}	$48.87 \mu m$	9.1	D^7	$70 \mu m$	18.7
RR	Rosin Rammler	$4.0e^{-4} - 40$	D^8	$80 \mu m$	24.4
(a)			D^9	$90 \mu m$	31
			D^{10}	$100 \mu m$	38.15
			(b)		

Table 5.6: Valeurs des diamètres moyens (a) et par classe (b), et le nombre de Stokes associé

alors qu'en masse, c'est la classe 5. De plus, la classe 1 est significative en nombre mais négligeable en masse, alors que c'est l'inverse pour la classe 8.

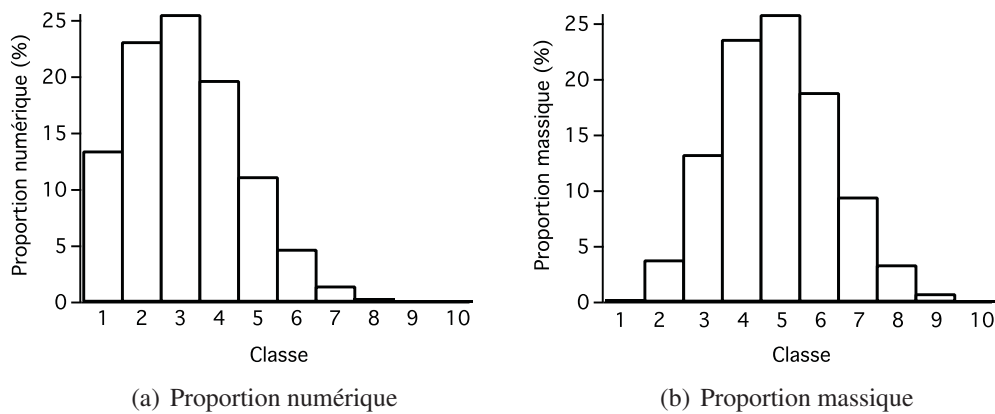


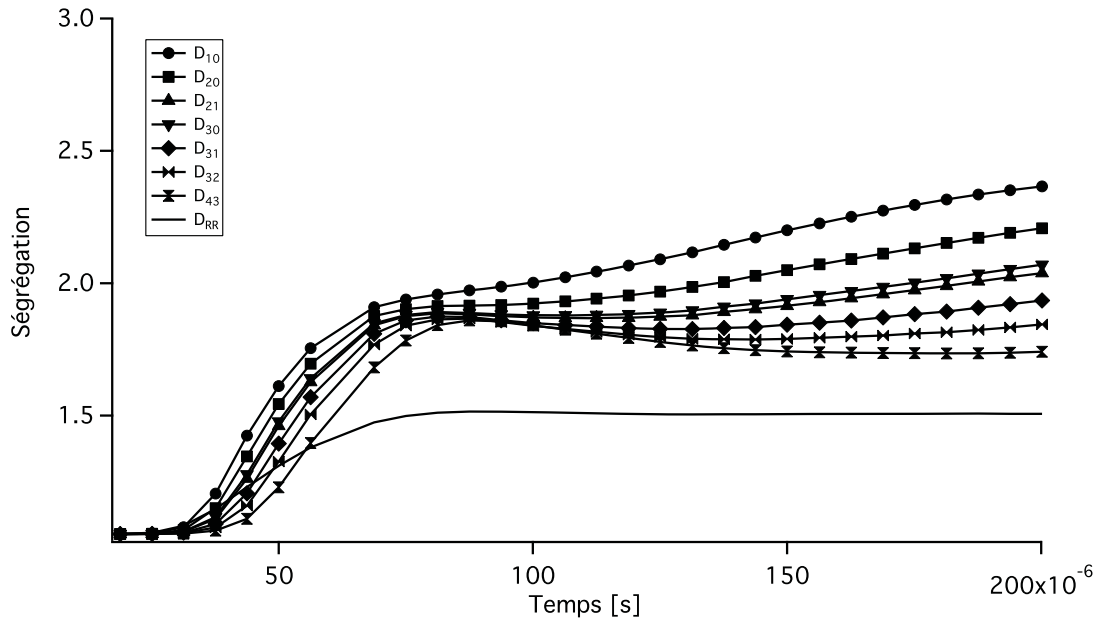
Figure 5.6: Proportion numérique (a) et massique (b) des différentes classes de gouttes dans la distribution polydisperse

5 Résultats sur la dynamique

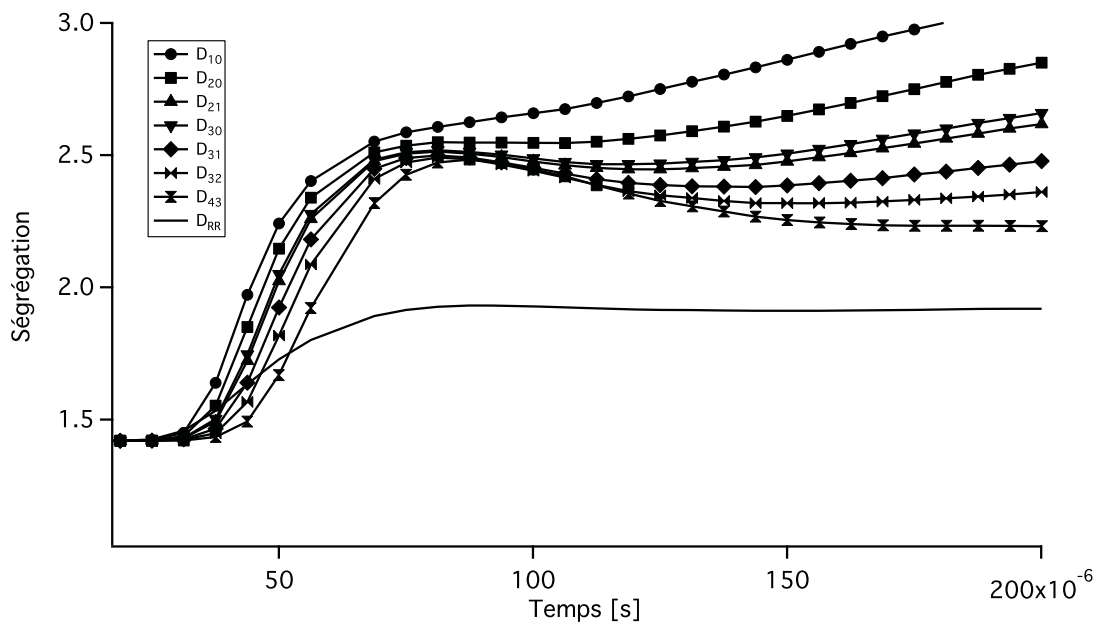
5.1 Ségrégation

La dynamique des particules est classiquement caractérisée par la ségrégation définie en éq 5.34. La résolution du maillage joue un rôle sur la convergence statistique : pour le maillage grossier, initialement, chaque cellule du domaine contient environ 20 particules alors que pour le maillage fin, le nombre de particules par maille est plus faible (8 particules en moyenne) et sa répartition initiale dans le domaine n'est pas parfaitement homogène. Cette différence implique qu'à $t = t_0$, la ségrégation pour le maillage grossier est bien égale à un mais vaut 1.4 pour le maillage fin (Fig 5.7). De plus, comme l'opérateur de moyenne $\langle \cdot \rangle$ utilise la maille comme volume de contrôle, le maillage fin implique un volume de contrôle plus faible, et donc une ségrégation plus grande (résultat en accord avec Moreau (2006)). Par conséquent, excepté quand cela sera explicité, l'ensemble des résultats utilise le maillage grossier.

Ce phénomène est amplifié quand il s'agit d'extraire la ségrégation par classe dans le calcul poly-disperse car il n'y a pas assez de gouttes par classe pour atteindre une convergence statistique et donc pour exploiter un résultat de ségrégation (Fig 5.8). C'est pourquoi des simulations monodisperses supplémentaires utilisant un diamètre représentant chacune des dix classes de la distribution de Rosin-Rammler (D^i) ont été effectuées.



(a) Maillage grossier



(b) Maillage fin

Figure 5.7: Impact du maillage sur la ségrégation pour les cas D_{10} , D_{20} , D_{21} , D_{30} , D_{31} , D_{32} , D_{43} et RR : (a) maillage grossier ; (b) maillage fin

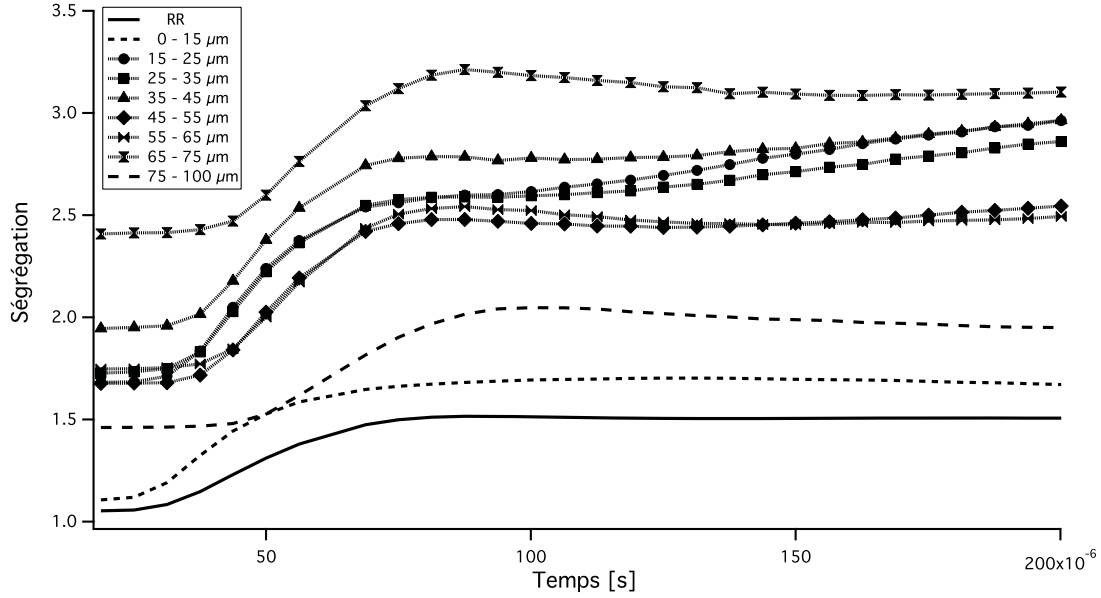


Figure 5.8: Ségrégation par classe extraite de la simulation polydisperse *RR*

Le nombre de simulations étant important, pour un souci de clarté, on ne montre pas tous les résultats sur le même graphique. On s'intéresse d'abord aux diamètres moyens (D_{ij} en Fig 5.7) : les résultats obtenus pour les calculs monodisperses sont en accord avec la théorie. En effet, les gouttes possédant un Stokes compris entre 1 et 10 subissent les effets de la phase porteuse en ségrégant : les gouttes les plus petites, et donc possédant le Stokes le plus proche de l'unité, subissent les effets du gaz plus rapidement et leur ségrégation est plus forte. Après la mise en équilibre plus ou moins rapide, la ségrégation continue d'augmenter, due à la THI décroissante (Moreau (2006)). Finalement, la simulation polydisperse ($0 < St_k < 40$) ne ressemble en rien à ses homologues monodisperses et une analyse plus fine s'impose.

Afin de mieux comprendre le résultat du cas *RR*, la ségrégation obtenue dans les calculs monodisperses avec les dix classes de goutte pour chaque classe est reportée en Figs. 5.9 et 5.10. Les comportements balistiques des classes de gouttes supérieures à $50 \mu m$ ($D^6, D^7, D^8, D^9, D^{10}$) sont là aussi bien capturés en Fig. 5.9. Leur Stokes important leur assure un temps de réponse au fluide plus grand. Pour les classes de gouttes plus petites (D^1, D^2, D^3, D^4, D^5), (Fig. 5.10), on observe un caractère analogue : comme attendu, la classe D^1 avec son Stokes inférieur à 1 se comporte en traceur, alors que la classe D^2 avec un Stokes très proche de 1, mais supérieur, subit la ségrégation la plus forte. L'évolution temporelle de la ségrégation pour le calcul polydisperse ne ressemble pas aux autres, mais reste encadrée par les cas monodisperses de petits diamètres.

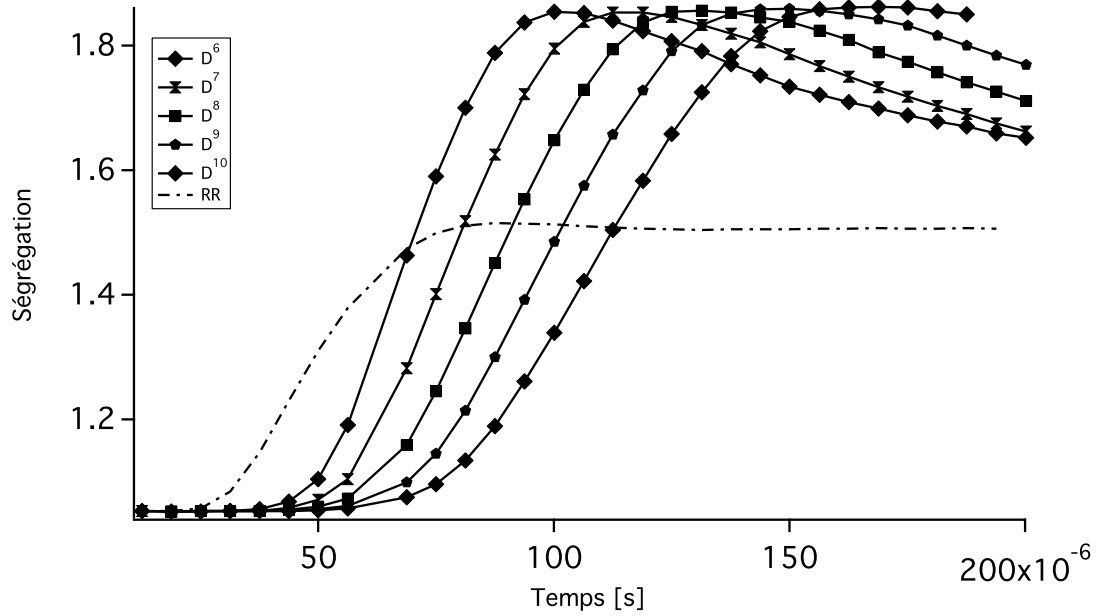


Figure 5.9: Ségrégation pour $D^6, D^7, D^8, D^9, D^{10}$ et RR

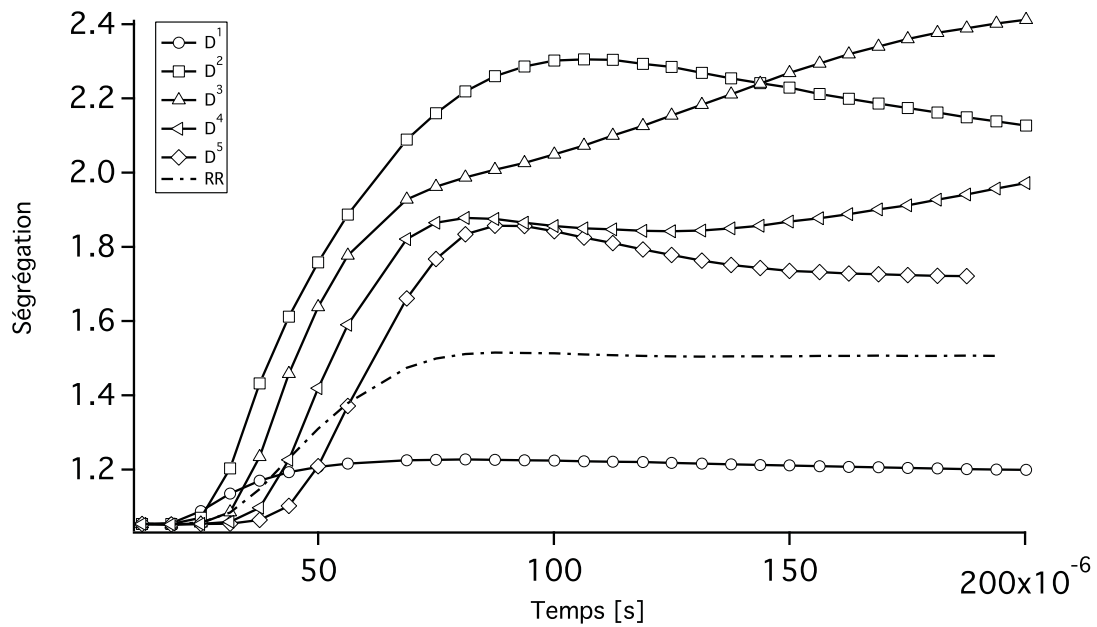


Figure 5.10: Ségrégation pour D^1, D^2, D^3, D^4, D^5 et RR

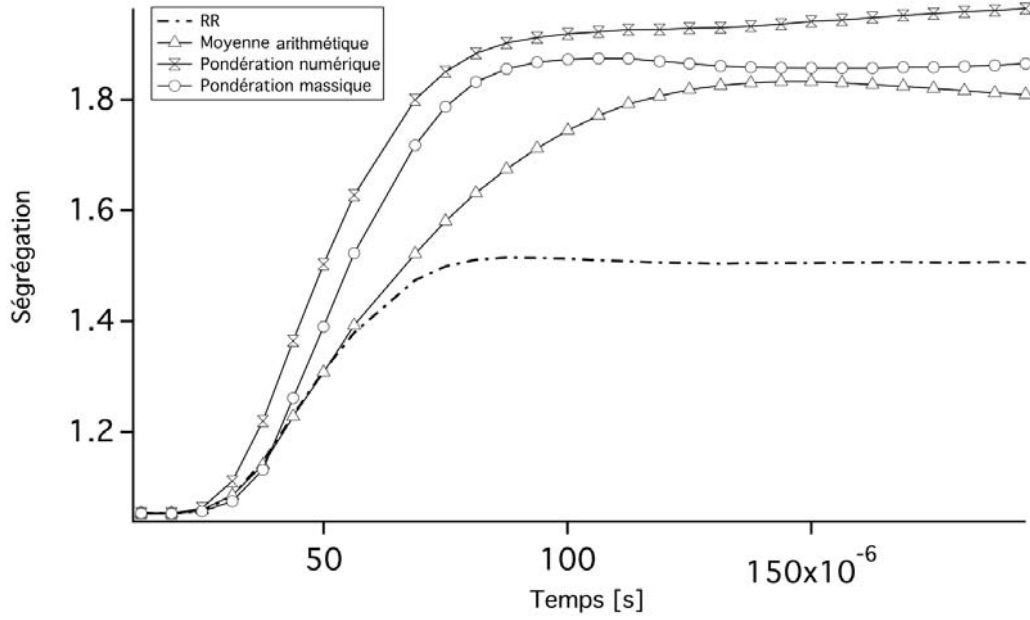


Figure 5.11: Ségrégation pour différentes contributions des classes et RR

Afin de mettre en évidence l'importance de chaque classe, une pondération par le nombre de particules par classe (Fig 5.6 a) et par la masse de particules par classe (Fig 5.6 b)), ainsi qu'une moyenne arithmétique sont proposées pour reconstituer la ségrégation du cas RR (Fig 5.11). Les pondérations par la masse et le nombre de chaque classe donnent des résultats analogues et surestiment la ségrégation du calcul polydisperse. En revanche, la simple moyenne donne un résultat proche de la ségrégation polydisperse jusqu'à $t = 50 \mu s$, ce qui laisse penser que pour la partie transitoire, aucun comportement prépondérant d'une classe par rapport à l'autre n'est à observer. La ségrégation étant très liée au nombre de Stokes, il est intéressant de pondérer les ségrégations par classe par l'inverse du Stokes (équ. 5.36) associé à chacune des classes. Les valeurs de ces poids sont présentées en Fig 5.12.

$$\omega_i = \frac{\frac{1}{St_k^i}}{\sum_{i=1}^{10} \frac{1}{St_k^i}} \quad (5.36)$$

Les résultats de cette pondération sont donnés en Fig. 5.13. On retrouve la ségrégation du cas RR avec cette distribution de poids. La ségrégation d'un spray polydisperse ne dépend donc pas de la proportion de diverses tailles de gouttes. Seules les classes ayant un Stokes faible ont une incidence sur l'évolution de la ségrégation du spray polydisperse. Ainsi en prenant seulement les premières classes (les 4 premières), on est capable de reproduire correctement le comportement d'une distribution polydisperse pour la ségrégation (Fig. 5.14).

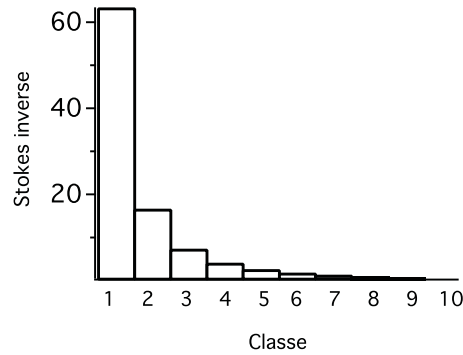


Figure 5.12: Poids calculés à partir du Stokes de chaque classe, appliqués pour chaque classe

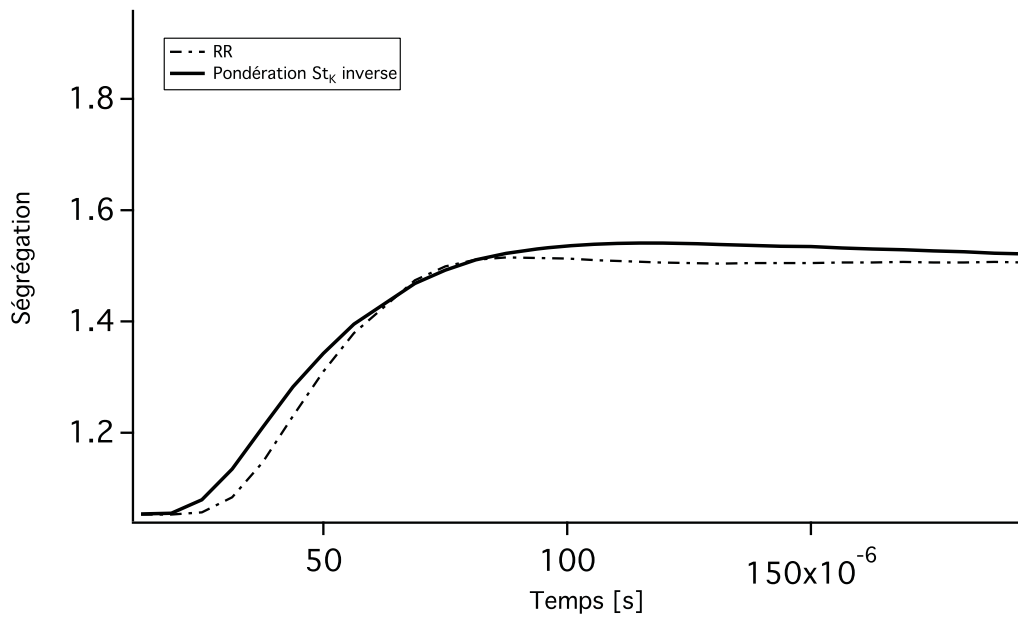


Figure 5.13: Ségrégation obtenue par pondération des ségrégations issues de D^1 à D^{10} par le Stokes inverse et du cas RR

Pour des cas de THI, le choix du temps caractéristique fluide est simple, puisqu'on choisit le temps caractéristique de Kolmogorov. Dans des cas plus généraux, ce choix est plus délicat et la pertinence du résultat est à remettre en cause.

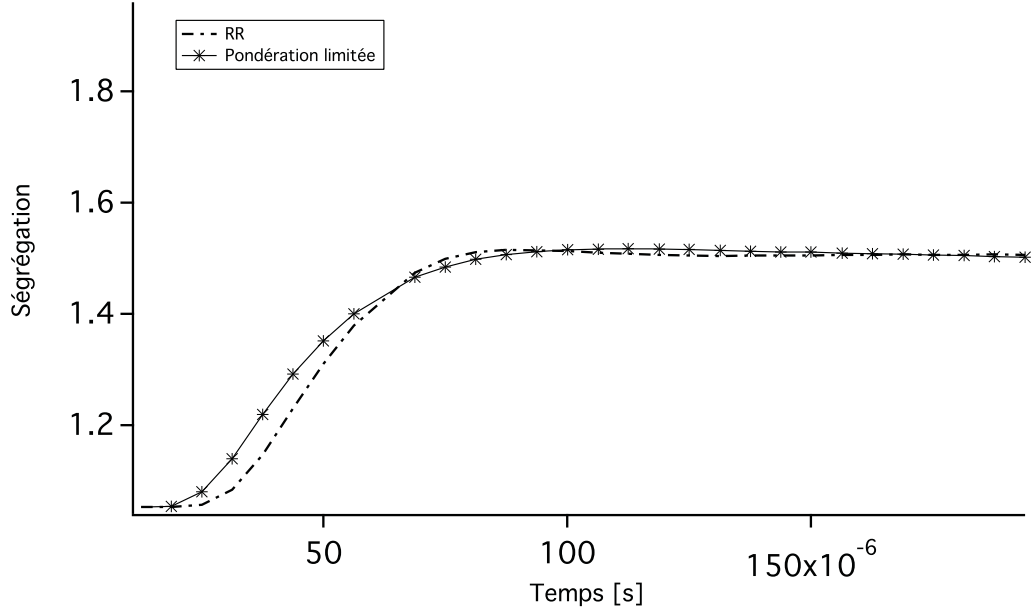


Figure 5.14: Ségrégation obtenue par pondération des ségrégations issues des cas D^1 , D^2 , D^3 et D^4 et du cas RR

5.2 Force de traînée

Pour s'affranchir des problèmes de convergence statistique, on peut regarder des grandeurs moyennes. La dispersion étant un effet de traînée, on étudie la force de traînée moyenne. On rappelle l'expression de la norme de la force de traînée pour une particule :

$$F_p^d = \frac{m_p}{\tau_p} ||u_g - u_p|| \text{ avec } \tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_g(1 + 0.15Re_p^{0.687})} \quad (5.37)$$

$$\text{avec } Re_p = \frac{\rho_g d_p ||u_g - u_p||}{\mu_g} \quad (5.38)$$

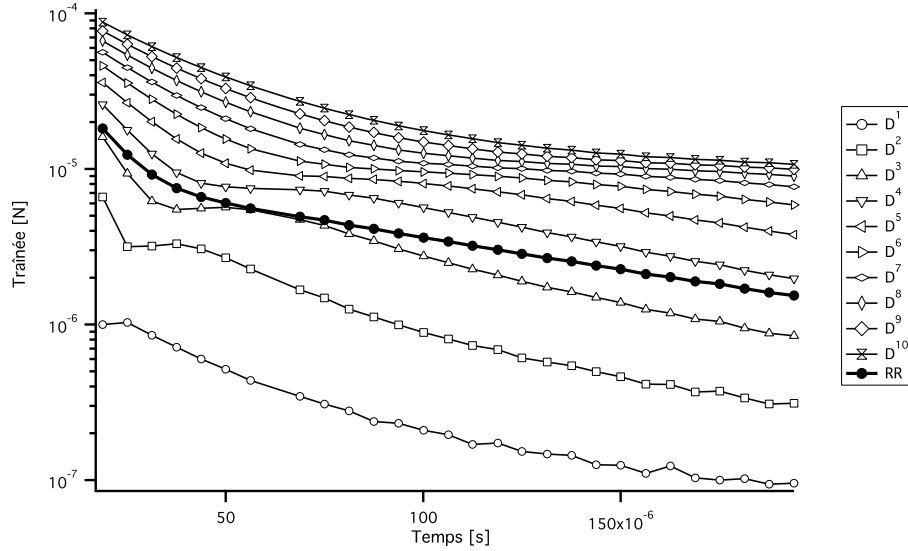
Ce qui donne après remplacement :

$$F_p^d = 3\pi\mu_g ||u_g - u_p|| d_p (1 + 0.15Re_p^{0.687}) \quad (5.39)$$

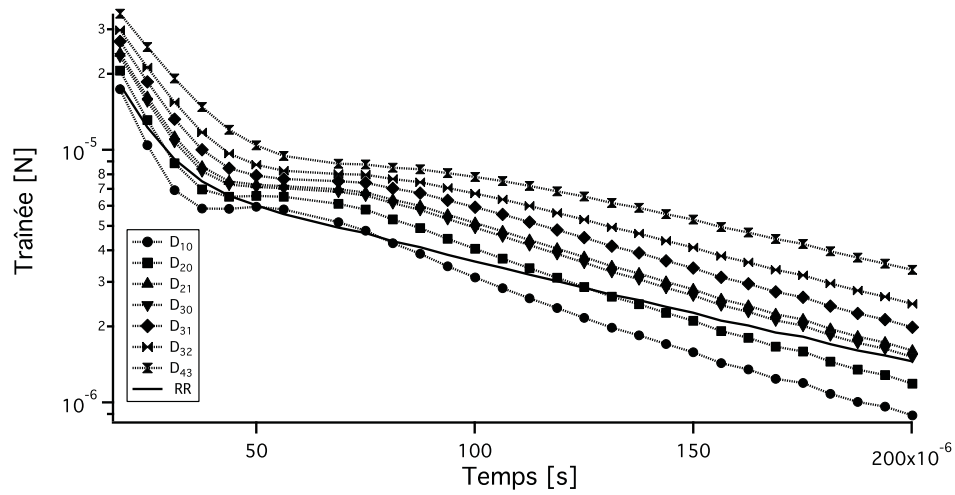
et en développant :

$$F_p^d = 3\pi\mu_g ||u_g - u_p|| d_p + 0.45\pi \frac{\mu_g}{\nu_g^{0.687}} ||u_g - u_p||^{1.687} d_p^{1.687} \quad (5.40)$$

En considérant un cas monodisperse ($d_p = cste$) et en posant $A = 3\pi\mu_g$ et $B = 0.45\pi\frac{\mu_g}{\nu_g^{0.687}}$, on obtient une fonction polynomiale de $X = ||u_g - u_p||d_p$, de la forme $F = AX + BX^{1.687}$.



(a) Évolution de la traînée moyenne au cours du temps pour les simulations monodisperses D^i et polydisperse RR



(b) Évolution de la traînée moyenne au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij} et polydisperse RR

Figure 5.15: Traînée moyenne au cours du temps pour les différentes simulations : (a) D^i et RR ; (b) D_{ij} et RR

On trace en Fig 5.15 l'évolution de la traînée moyenne au cours du temps, pour les diverses simulations monodisperses, et pour le cas polydisperse. On observe que :

- La décroissance de l'énergie cinétique conduit bien une force de traînée moyenne décroissante.
- Toutes les courbes issues des simulations monodisperses possèdent un profil similaire : elles décroissent en passant par un palier, plus ou moins marqué selon la taille de gouttes et donc le temps caractéristique particulière. On retrouve le comportement des courbes de ségrégation, avec une première phase rapide de mise à l'équilibre puis une phase plus lente suivant la décroissance de la turbulence.
- L'ordre est toujours conservé : les courbes ne se croisent pas.
- La courbe polydisperse possède un comportement sensiblement différent des courbes monodisperses et intermédiaire :
 - elle est bornée par les courbes des gouttes de $30 \mu m$ et $40 \mu m$
 - elle présente une première partie de mise à l'équilibre moins marquée
 - une deuxième phase est induite par la décroissance de la turbulence

Dans ce cas précis, si on additionne les différentes forces de traînée issues des simulations monodisperses, pondérées par le nombre de gouttes présentes dans la simulation polydisperse, on retrouve parfaitement l'évolution de la traînée polydisperse. Celle-ci est bornée par les gouttes de $30 \mu m$ et celle de $40 \mu m$, c'est-à-dire proches de D_{10} , D_{20} , D_{21} et D_{30} .

Le même type d'expression peut être donnée pour la traînée réduite, définie en éq. 5.41 et on a :

$$F_{red} = \frac{F_p^d}{m_p} \quad (5.41)$$

$$F_{red} = \frac{A'X + B'X^{1.687}}{d_p^3} \text{ avec } A' = \frac{18\nu_g}{\rho_p} \text{ et } B' = \frac{2.7\mu_g}{\rho_p\nu_g^{0.627}} \quad (5.42)$$

La Figure 5.16 montre l'évolution de la traînée réduite moyenne au cours du temps, pour les diverses simulations monodisperses, et pour le cas polydisperse. L'expression de la traînée réduite moyenne n'est en fait que l'expression d'une accélération de la phase particulière par la phase porteuse. On observe des comportements comparables à la Fig. 5.15 pour la traînée moyenne :

- La décroissance de l'énergie cinétique conduit à une force de traînée réduite moyenne décroissante.

- Toutes les courbes issues des simulations monodisperses possèdent un profil similaire : elles présentent un palier, et semblent finalement converger vers un état commun.
- L'ordre est toujours conservé : les courbes ne se croisent pas.
- La courbe polydisperse possède un comportement éloigné puisqu'elle s'écarte de manière significative des courbes issues des simulations monodisperses. Mais comme dans l'expression de la traînée moyenne, elle ne présente pas de palier, caractéristique d'un temps particulière propre.

La simulation polydisperse semble ici encadrée par les deux tailles de goutte $10\ \mu m$ et $20\ \mu m$. Ainsi l'évolution de l'accélération moyenne se rapproche de celle des gouttes de $10\ \mu m$ et $20\ \mu m$, comme la ségrégation.

En conclusion, la dynamique d'un spray polydisperse est contrôlée par un nombre fini de classes monodisperses. Le choix de ces classes s'effectue en tenant compte du nombre de Stokes. Bien que les diamètres les plus petits donnent de bons accords avec le spray polydisperse pour la ségrégation et la traînée réduite moyenne, ils ne quantifient que la classe de gouttes qui interagit le plus avec le fluide. Afin de mieux rendre compte de la dynamique globale du spray, les bons accords obtenus en termes de traînée moyenne conduisent à choisir le D_{10} comme diamètre équivalent pour la dynamique.

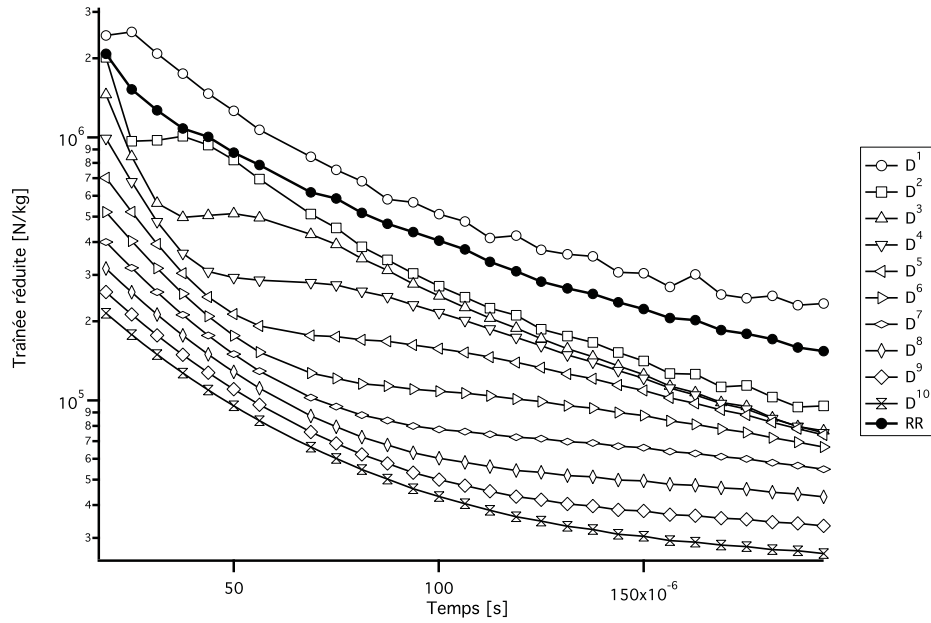
6 Evaporation d'un spray pour différentes distributions de taille

6.1 Méthodologie

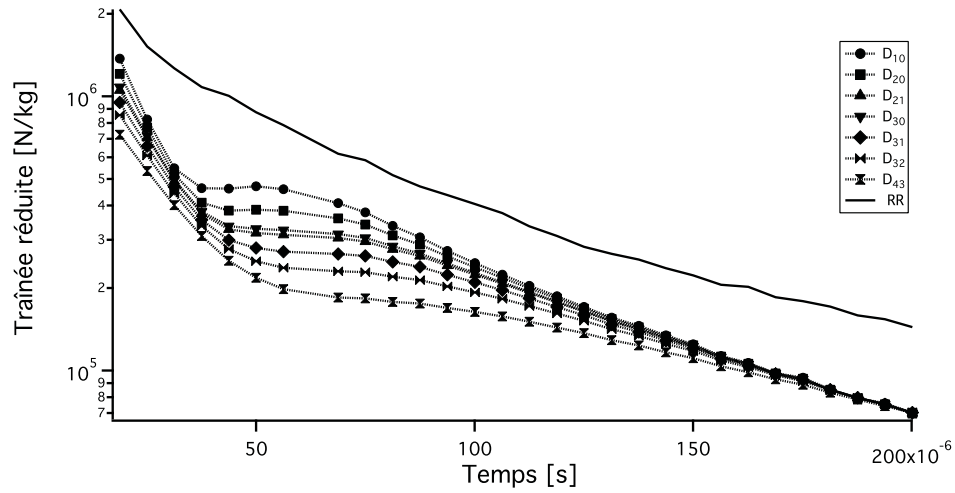
Pour étudier l'évaporation, on étudie des sprays en 0D, c'est-à-dire sans écoulement. On réalise 11 calculs diphasiques évaporants, 10 monodisperses et 1 polydisperse. Pour le calcul polydisperse, on introduit 100 000 particules dans la distribution de Rosin-Rammler (Fig 5.5) dans un domaine cubique, et on initialise un champ de vitesse particulière nulle. Aux diamètres moyens D_{ij} de la section précédente, on ajoute des diamètres définis dans la littérature des lits fluidisés (section 6.2).

6.2 Diamètres issus de la littérature des lits fluidisés

L'étude des lits fluidisés (Peirano and Leckner (1998); Gevrin et al. (2008); Fede et al. (2010)) introduit des diamètres définis par rapport à la masse cumulée : $D^{\alpha\%}$ est le diamètre pour lequel $\alpha\%$ de la masse est contenue pour $D < D^{\alpha\%}$ (table 5.7 et éq. 5.43).



(a) Évolution de la traînée réduite moyenne au cours du temps pour les simulations monodisperses D^i et polydisperse RR



(b) Évolution de la traînée réduite moyenne au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij} et polydisperse RR

Figure 5.16: Traînée réduite moyenne au cours du temps pour les différentes simulations : (a) D^i et RR ; (b) D_{ij} et RR

Symbole	Calcul
$D^{10\%}$	Diamètre correspondant à 10% de la masse totale
$D^{50\%}$	Diamètre correspondant à 50% de la masse totale
$D^{90\%}$	Diamètre correspondant à 90% de la masse totale

Table 5.7: Diamètres issus de la littérature des lits fluidisés et leur définition

Ainsi, on a :

$$\int_0^{D^\alpha} m_p(d_p) RR(d_p) dd_p = \alpha \int_{RR} m_p(d_p) RR(d_p) dd_p \quad (5.43)$$

6.3 Cas simulés

Les conditions de pression ambiante sont appliquées ($P = 1 \text{ bar}$) mais la température gazeuse est égale à $T = 500 \text{ K}$, et les gouttes sont initialement à 300 K . L'unique paramètre variant ici étant la distribution initiale, les simulations portent le même nom que le diamètre initial, et le nom RR pour le calcul polydisperse.

6.4 Résultats

Dans un souci de clarté, on ne présente pas tous les résultats sur le même graphique. La Figure 5.17 présente l'évolution du carré du diamètre adimensionné par le diamètre initial pour les différents calculs monodisperses D_{ij} . On retrouve la loi du d^2 , caractéristique de l'évolution du diamètre d'une goutte évaporante, pour chacune des simulations monodisperses. Le tableau 5.9 présente les temps d'évaporation pour chacun des diamètres.

Diamètre	Taille	Temps d'évaporation
D_{10}	$31.4 \mu m$	12.8 ms
D_{20}	$34.65 \mu m$	15.7 ms
D_{30}	$37.55 \mu m$	18.6 ms
D_{21}	$38.27 \mu m$	19 ms
D_{31}	$41.02 \mu m$	22 ms
D_{32}	$44 \mu m$	25 ms
D_{43}	$48.87 \mu m$	31 ms

Table 5.8: Diamètres moyens D_{ij} et temps nécessaire à l'évaporation complète

La Figure 5.18 présente l'évolution au cours du temps de la masse adimensionnée par la masse

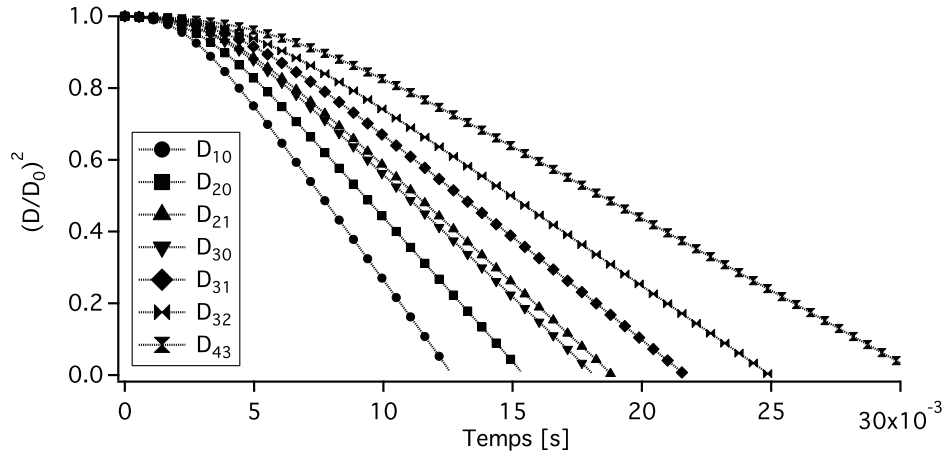


Figure 5.17: Évolution du diamètre adimensionné au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij}

initiale pour les simulations D_{ij} et RR . Le spray polydisperse a un comportement très différent de ses homologues monodisperses.

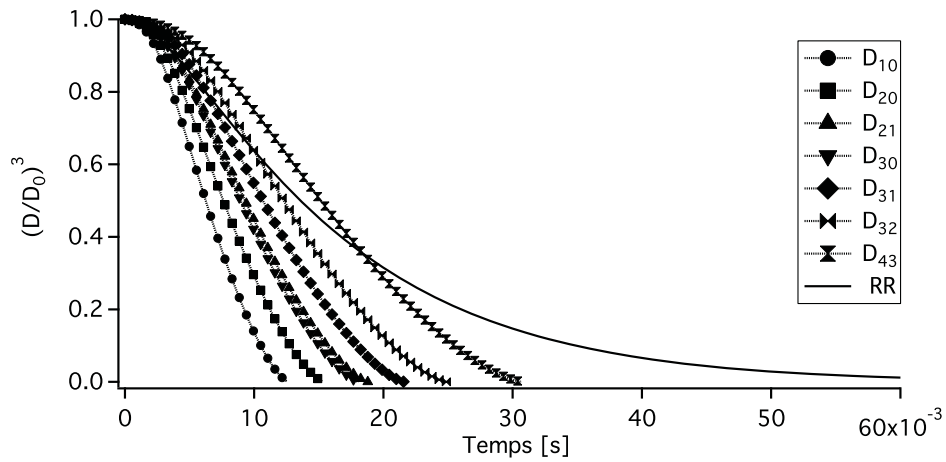


Figure 5.18: Evolution de la masse adimensionnée au cours du temps pour les simulations monodisperses D_{ij} et polydisperse RR

Une étude par classe est reportée en Fig 5.19, où on trace l'évolution d'une classe de gouttes issue de RR , comparée à l'évolution des diamètres moyens qui bornent cette classe. On s'intéresse à deux cas :

- la classe de gouttes comprises entre 30 et 40 microns, bornée par D_{10} et D_{21} (Fig 5.19 (a))
- la classe de gouttes comprises entre 40 et 50 microns, bornée par D_{31} et D_{43} (Fig 5.19 (b))

Le constat est identique : une fois que les gouttes les plus petites de la classe sont évaporées (représentées par le diamètre moyen inférieur), c'est l'évaporation des plus grosses gouttes qui représente l'évolution de la classe, jusqu'à l'évaporation des gouttes de plus grande taille (représentées par le diamètre moyen supérieur). Le même résultat est obtenu en comparant l'évolution de la distribution polydisperse bornée par deux classes complémentaires (les gouttes inférieures à $50 \mu m$ et celle plus grandes), en Fig 5.20.

La différence importante entre un comportement monodisperse et polydisperse est due à la présence de gouttes de grande taille, qui ont un temps d'évaporation très grand (en moyenne 3 fois plus long que celui du D_{30}) et qui représentent une proportion non négligeable en termes de masse. Aucun des diamètres moyens définis plus haut ne semble donc convenir pour l'évaporation d'un spray polydisperse.

On compare maintenant les valeurs et les temps d'évaporation des diamètres $D^{\alpha\%}$ (table 5.9). L'évolution de la masse adimensionnée entre RR , et les diamètres $D^{\alpha\%}$ est comparée en Fig. 5.21.

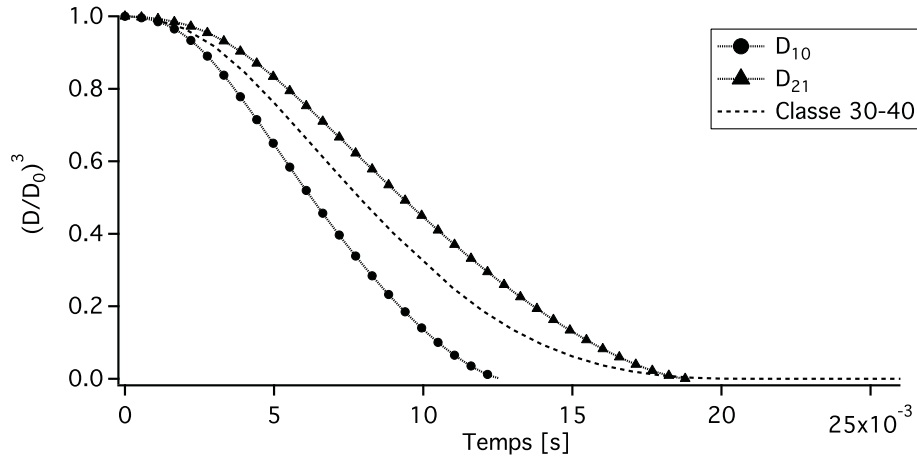
Diamètre	Taille	Temps d'évaporation
$D^{10\%}$	$30.42 \mu m$	12 ms
$D^{50\%}$	$47.27 \mu m$	28.7ms
$D^{90\%}$	$68.24 \mu m$	60 ms

Table 5.9: Diamètres moyens $D^{\alpha\%}$, leur valeurs et le temps nécessaire à l'évaporation complète

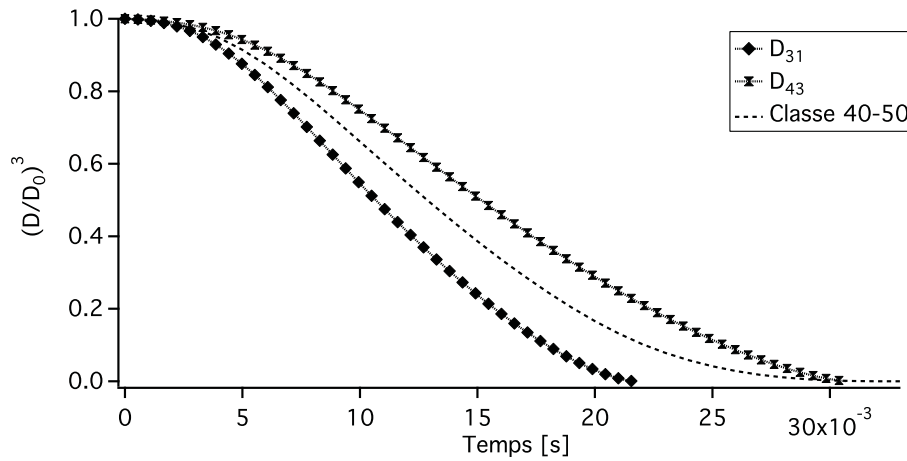
Le $D^{\alpha\%}$ signifie que, à $t = t_0$ donné, toute goutte inférieure à cette valeur est évaporée, et que l'ensemble des gouttes inférieures à cette valeur représente $\alpha\%$ de la masse initiale. Cette définition semble être bien plus adéquate pour le phénomène d'évaporation. L'utilisation du $D^{90\%}$ caractérise bien l'état final du spray mais pas son évolution dans le temps. Le $D^{50\%}$ semble un bon compromis et se place entre le D_{32} et le D_{43} .

7 Conclusion

Une étude de l'impact de la distribution en taille de gouttes sur la dynamique et l'évaporation des sprays a été réalisée. A ce titre, des calculs de THI sans rétro couplage des particules sur le gaz, et sans interaction entre particules, ont été réalisés pour simuler la dynamique de la phase particulaire et des calculs 0D ont permis d'étudier l'évaporation. Ces simulations ont montré une forte



(a) Evolution de la classe de goutte 30-40 microns bornée par D_{10} et D_{21}



(b) Evolution de la classe de goutte 40-50 microns bornée par D_{31} et D_{43}

Figure 5.19: Évolution de la masse adimensionnée de deux classes de goutte extraites de RR et bornées par des diamètres moyens D_{ij} au cours du temps : (a) classe de goutte 30-40 microns bornée par D_{10} et D_{21} ; (b) classe de goutte 40-50 microns bornée par D_{31} et D_{43}

disparité en ce qui concerne le comportement des gouttes.

En termes de dynamique, et donc de nombre de Stokes, la ségrégation issue d'un calcul polydisperse peut être approchée par la somme des ségrégations d'un ensemble discret de classe de gouttes. Les poids associés à chacune de ses classes sont égaux à l'inverse du nombre de Stokes de la classe. Le poids des classes ayant le Stokes le plus important étant faible, il suffit des classes les plus petites pour reproduire la ségrégation du calcul polydisperse. La traînée réduite moyenne

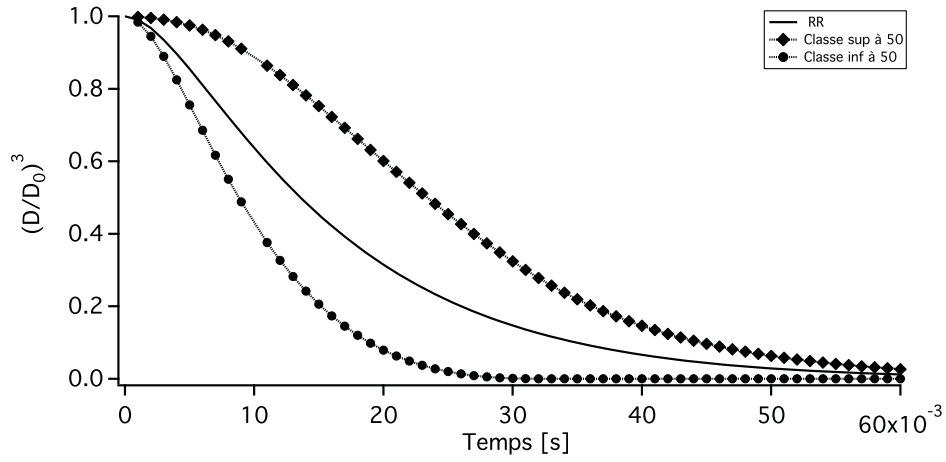


Figure 5.20: Évolution de la masse adimensionnée de RR bornée par la classe des diamètres inférieurs à 50 microns et supérieurs à 50 microns au cours du temps

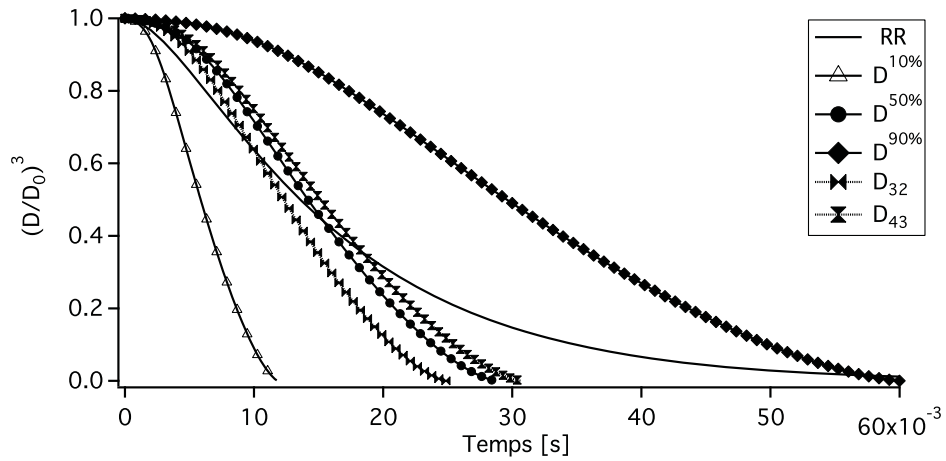


Figure 5.21: Évolution de la masse adimensionnée de RR comparée à l'évolution de $D^{10\%}$, $D^{50\%}$ et $D^{90\%}$ au cours du temps

donne un résultat proche de celui de la ségrégation encadrée par D^1 et le D^2 . Pour la simulation polydisperse, ce terme se situe entre la traînée réduite des gouttes de 10 microns et celles de 20 microns, ce qui laisse supposer que le terme d'accélération est bien plus dépendant des gouttes de taille faible. L'évolution du terme de traînée moyenne montre que celle-ci évolue entre la traînée des gouttes de diamètres D_{10} et D_{20} .

La comparaison de l'évaporation des cas monodisperses et polydisperse a montré que la

présence de gouttes de taille importante a un effet prépondérant sur l'évolution de la masse au cours du temps. Aucun des diamètres moyens ne semblent caractériser correctement l'évaporation d'un spray polydisperse. Néanmoins, la définition d'autres diamètres issus de la littérature liée aux lits fluidisés permet de définir un diamètre cohérent avec le phénomène d'évaporation, le $D^{50\%}$. Dans le cas de la distribution Rosin-Rammler choisie dans ce chapitre, le diamètre se situe entre les diamètres D_{32} et D_{43} . Dans la mesure où le diamètre D_{32} est donné dans les mesures expérimentales du chapitre 6, il sera choisi pour caractériser la distribution polydisperse.

Néanmoins, cette étude a été réalisée pour une seule distribution polydisperse. Il conviendrait donc de la réitérer pour d'autres distributions ayant une répartition différente de gouttes (distribution bimodale). De la même façon, différentes phases porteuses devraient être testées. Par la suite, l'ajout du rétro-couplage pourrait apporter des résultats complémentaires. Enfin, la phase liquide considérée ne correspond qu'à une seule espèce. Dans le cas où on considère plusieurs composants, l'évaporation de l'ensemble des espèces est à évaluer.

Partie II

Impact de la taille de goutte et comparaisons des formalismes pour la phase dispersée

Chapitre 6

Impact de la taille des gouttes et comparaison des formalismes pour la phase dispersée dans la configuration MERCATO

Sommaire

1	Présentation du banc expérimental	176
1.1	<i>Point de fonctionnement et données expérimentales</i>	177
1.2	<i>Simulations réalisées</i>	177
1.3	<i>Grandeurs caractéristiques de l'écoulement</i>	179
2	Méthode numérique	180
2.1	<i>Description du domaine numérique et des maillages</i>	180
2.2	<i>Conditions aux limites</i>	182
2.3	<i>Initialisation</i>	182
2.4	<i>Modèles utilisés</i>	183
3	Topologie de l'écoulement diphasique réactif	183
3.1	<i>Dynamique de la phase gazeuse</i>	183
3.2	<i>Dynamique de la phase liquide</i>	188
3.3	<i>Interaction spray-flamme</i>	191
4	Structure de flamme	200
4.1	<i>Analyse qualitative</i>	200
4.2	<i>Analyse quantitative</i>	203
5	Premiers résultats avec l'approche Euler-Euler	211
5.1	<i>Méthode numérique</i>	211
5.2	<i>Analyse de l'écoulement transitoire, de l'allumage à la flamme stabilisée</i>	216

chapitre 6. Impact de la taille des gouttes et comparaison des formalismes pour la phase dispersée dans la configuration MERCATO

5.3	Topologie de l'écoulement diphasique réactif et structure de flamme	220
6	Conclusion.	222

Les parties précédentes ont été consacrées à l'étude isolée des phénomènes apparaissant dans les chambres de combustion : injection et dynamique du spray dans un écoulement laminaire, impact de la taille de goutte et de la polydispersion sur la dynamique et l'évaporation. Le pas suivant est l'étude de la flamme diphasique en combustion turbulente, dans un écoulement typique d'une chambre de combustion. La physique de tels écoulements est complexe puisqu'elle est le fruit du couplage entre le spray, la turbulence et la combustion et peu de simulations et de mesures sont disponibles. Des travaux de simulations aux grandes échelles ont néanmoins été réalisées : [Lederlin and H.Pitsch \(2008\)](#) effectuent des simulations aux grandes échelles de spray évaporant et réactif dans la configuration MERCATO. Les résultats pour le cas réactif présentent une structure de flamme où la majorité des gouttes s'évaporent après l'injection. Seules quelques gouttes sont convectées dans la zone des gaz brûlés. [Jones et al. \(2012\)](#) effectuent des comparaisons entre des Simulations aux grandes échelles d'écoulements diphasiques réactifs d'une part, et des expériences d'autre part. La flamme est stabilisée par un swirler et la phase dispersée est simulée via un formalisme Lagrangien. De bons résultats sont obtenus. Des calculs DNS ont également été réalisés. [Luo et al. \(2011\)](#) effectue la simulation numérique directe de flammes diphasiques de n-heptane dans une chambre swirlée. Une structure de flamme complexe apparaît avec une flamme de prémélange, suivie de poches de gouttes et de kérosène qui brûlent en diffusion dans les gaz chauds.

Dans ce chapitre, la structure de flamme diphasique dans une chambre aéronautique est étudiée avec un accent particulier sur l'impact de la distribution de tailles de gouttes. La configuration est la chambre MERCATO de l'ONERA, pour laquelle de nombreuses mesures ont été réalisées à différents points de fonctionnement, et notamment en combustion. Les premières études expérimentales ont été réalisées par [García-Rosa \(2008\)](#), sous la supervision de R. Lecourt et ont permis l'obtention d'un grand nombre de données, d'abord en configuration évaporante : des mesures de vitesses axiales gazeuses et liquides et leur fluctuations, ainsi que des mesures de taille de gouttes avaient été effectuées. Elles ont permis l'étude de la phase dispersée non réactive par une approche Eulérienne pour la phase dispersée par [Lamarque \(2007\)](#) et [Sanjosé \(2009\)](#). [Roux \(2009\)](#) a lui aussi simulé l'écoulement turbulent diphasique en ajoutant et comparant un nouveau schéma numérique (PSI ([Struijs \(1994\)](#))) pour la phase dispersée. [Roux et al. \(2009\)](#) a montré que l'utilisation du schéma PSI, bien que plus robuste pouvait apporter une perte de précision, ce que [Sanjosé \(2009\)](#) a confirmé dans ses travaux. Des études similaires sur la phase dispersée ont été réalisées par [Senoner \(2010\)](#) en utilisant le formalisme Lagrangien afin de valider un modèle d'atomisation secondaire. La différence de formalismes a elle aussi été comparée par [Sanjosé \(2009\)](#) et [Senoner \(2010\)](#) avec des expériences. L'approche Eulérienne multiclasse développée par [Vie \(2010\)](#) a été testée sur le banc MERCATO et apporte les premiers résultats Eulériens polydispersés sur cette configuration. Des travaux plus récents par [Linassier et al. \(2011\)](#) ont permis l'accès à d'autres mesures de vitesses axiales gazeuse et liquide, ainsi que des mesures de taille de gouttes en proche injection, et une visualisation par transformée d'Abel de la flamme, pour différents points de fonctionnement. La configuration MERCATO a permis aussi la validation d'un nouveau modèle d'évaporation par [Sierra \(2012\)](#), ainsi qu'une comparaison des modèles de RUM. La validation d'un outil de prédiction d'allumage dans les chambres aéronautiques a été inves-

chapitre 6. Impact de la taille des gouttes et comparaison des formalismes pour la phase dispersée dans la configuration MERCATO

tiguée par [Eyssartier et al. \(2012\)](#); [Bruyat \(2012\)](#), en comparaison avec des séquences d'allumage par dépôt d'énergie. Cette dernière a aussi étudié l'évaporation des combustibles liquides multi-composants ([Bruyat \(2012\)](#)).

On va donc étudier la structure de l'écoulement diphasique réactif dans la chambre MERCATO sur le point de fonctionnement de [Linassier et al. \(2011\)](#). Trois distributions de gouttes sont testées afin de comprendre leur impact sur la structure de flamme diphasique. Le chapitre s'articule ainsi :

- Présentation du banc MERCATO et des maillages, points de fonctionnement et modèles utilisés.
- Résultats sur les champs moyens
- Comparaison des simulations par analyse des champs instantanés
- Caractérisation du régime de combustion
- Premiers résultats avec le formalisme Eulérien

1 Présentation du banc expérimental

Le banc MERCATO se situe à l'ONERA Fauga Mauzac, près de Toulouse.

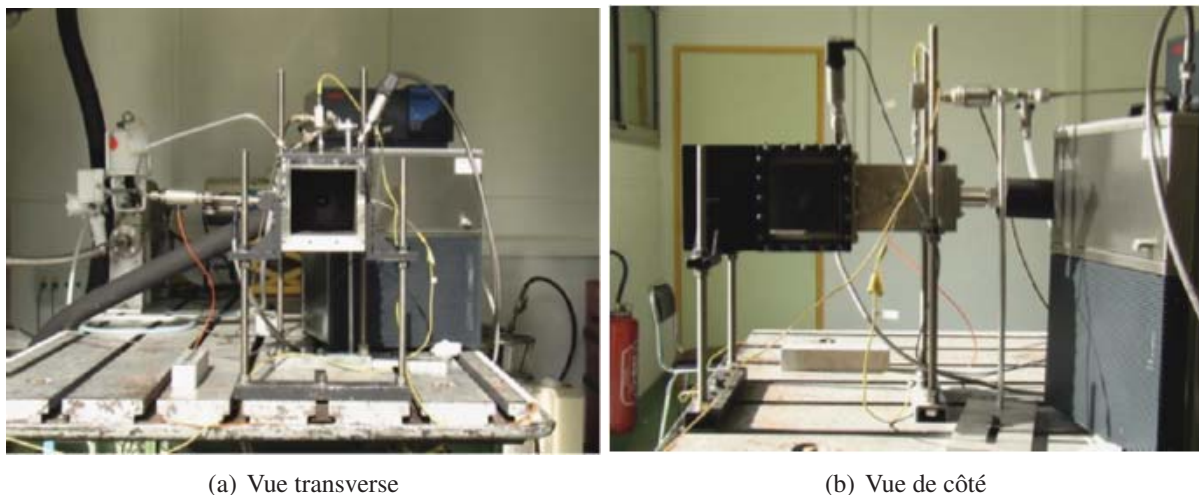


Figure 6.1: Dispositif expérimental du banc MERCATO

La Figure 6.1 présente la géométrie du banc MERCATO, tel qu'il est monté à l'ONERA Fauga Mauzac, avec une partie de l'instrumentation nécessaire à la capture des données expérimentales.

Il est composé de l'ensemble des éléments que l'on retrouve dans une chambre de combustion, comme le plenum, le swirler, l'injecteur de carburant liquide et la chambre de combustion. On parle de géométrie complexe, puisque le plenum rempli en air vient alimenter un swirler radial divisé en 12 veines, qui induisent un mouvement de rotation de l'air débitant dans la chambre de combustion. Au centre de ce swirler se trouve l'injecteur de carburant, qui est un injecteur pilote modifié de la chambre d'hélicoptère MAKILA (TURBOMECA), relatif au procédé d'atomisation de type Delavan introduit par le biais du modèle FIM-UR dans le Chapitre 4. L'écoulement diphasique débouche dans une chambre de combustion de forme rectangulaire (13 cm^2 de section). Cette chambre est munie d'un hublot transparent permettant la visualisation de la flamme.

1.1 Point de fonctionnement et données expérimentales

Dans le cas réactif, l'utilisation de la technique d'anémométrie Laser Doppler (LDA) a permis de capturer les profils de vitesses axiale moyenne et fluctuante gazeuses à différentes positions axiales en aval de l'injecteur : 10 mm, 26 mm, 56 et 116 mm (Linassier et al. (2011)). Les données sont extraites à diverses positions verticales et horizontales (Fig 6.2 (a)). La technique d'anémométrie Phase Doppler (PDA) a permis de capturer les profils de vitesse axiale moyenne et fluctuante liquide dans les quatre mêmes sections. Des profils de D_{32} et de D_{10} sont disponibles à $x = 10 \text{ mm}$. En termes de combustion, une transformée d'Abel de la visualisation de la flamme moyenne (Fig. 6.2 (b)) donne une représentation de la flamme proche injecteur. Elle met en évidence deux zones de flamme : une zone réactive proche injection, dense en gouttes à l'intérieur du cône formé par les gouttes éjectées de l'injecteur Delavan, et une zone réactive beaucoup moins chargée en particules à l'extérieur de ce cône. La table 6.1 présente le point de fonctionnement.

Débit liquide	Débit gazeux	Pression	Température (gaz et liquide)	Richesse globale	Nombre de Reynolds
2.26 g/s	35,5 g/s	1 atm	285 K	0.95	90 000

Table 6.1: Paramètres du point de fonctionnement

1.2 Simulations réalisées

Les mesures de diamètres moyens (D_{32} et D_{10}) en proche injecteur permettent de reconstruire une distribution de Rosin Rammler (Fig. 6.3). Les conclusions du chapitre 5 sur le choix de diamètres moyens à choisir pour représenter un spray polydisperse implique de prendre $D_{10} = 31.35 \text{ }\mu\text{m}$ pour la dynamique et $D_{32} = 44 \text{ }\mu\text{m}$ pour l'évaporation. En conséquence, deux simulations monodisperses supplémentaires seront effectuées en utilisant les diamètres moyens.

La table 6.2 présente l'ensemble des simulations effectuées.

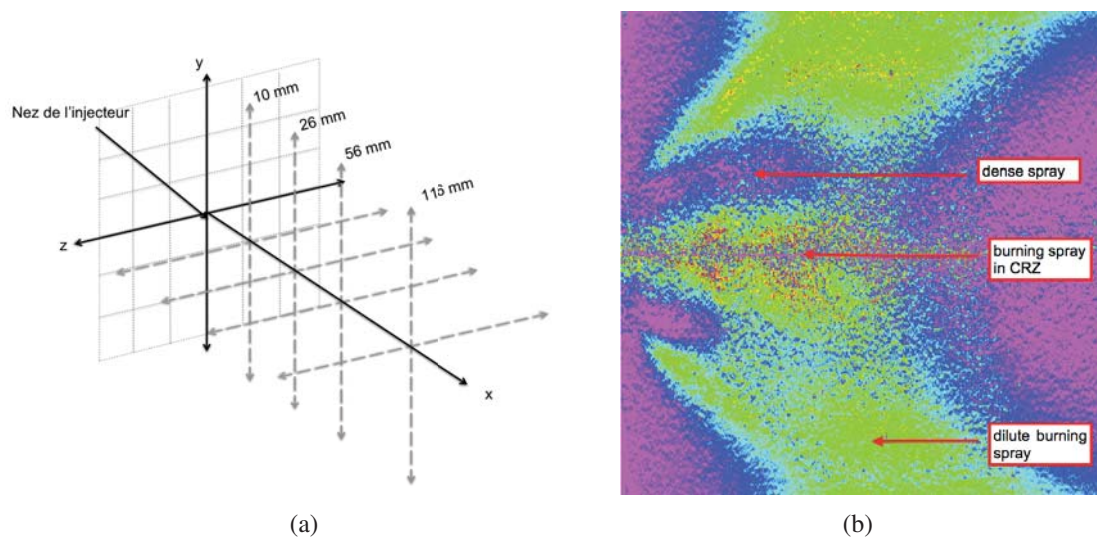


Figure 6.2: Positions axiales des relevés des données expérimentales et visualisation de la flamme par transformée d'Abel (Linassier et al. (2011))

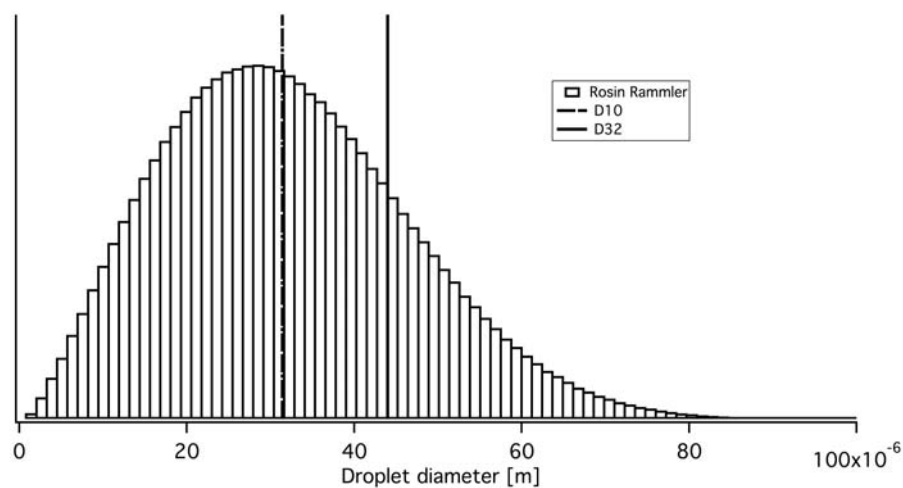


Figure 6.3: Distribution de Rosin-Rammler reconstruite à partir des données de Linassier et al. (2011) et distributions monodisperses choisies D_{10} et D_{32}

Run	Distribution de gouttes
ELD_{10}	Monodisperse $31.35 \mu m$
ELD_{32}	Monodisperse $44 \mu m$
$ELRR$	Polydisperse RR

Table 6.2: Paramètres des différentes simulations effectuées

1.3 Grandeurs caractéristiques de l'écoulement

1.3. 1) Temps caractéristiques de l'écoulement

Plusieurs temps caractéristiques peuvent être évalués dans cet écoulement diphasique réactif.

1. Le temps de convection est défini comme étant le temps nécessaire au fluide pour réaliser un trajet complet dans la chambre. Pour le quantifier, on néglige le mouvement de rotation induit par le swirl :

$$\tau_{conv} = \frac{L_{chamber}}{u_{bulk}} = 7.5 \text{ ms} \quad (6.1)$$

où $L_{chamber}$ est la longueur de la chambre et u_{bulk} est la vitesse axiale moyenne en sortie du swirler.

2. Le temps de rotation de l'écoulement est directement lié à la vitesse tangentielle. Il représente le temps nécessaire pour que le fluide fasse un tour sur lui-même. Ici l'expansion radiale de l'écoulement est négligée :

$$\tau_{swirl} = \frac{R_d \pi}{u_{\theta,x}} = 0.6 \text{ ms} \quad (6.2)$$

où R_d est le rayon du diffuseur en sortie du swirler, et $u_{\theta,x}$ est la vitesse tangentielle moyenne en sortie du diffuseur.

3. Le temps de relaxation particulaire est totalement dépendant de la taille de la goutte. Dans le cas de calcul évaporant, le diamètre de gouttes évolue dans le temps, et possède donc un temps de réponse qui évolue lui aussi dans le temps.
4. Le temps d'évaporation est défini comme le temps nécessaire à l'évaporation complète d'une goutte. Ce temps d'évaporation dépend de nombreux paramètres, notamment de la température de la phase gazeuse, très importante dans un cas réactif .

Ces deux derniers temps sont reportés pour chaque simulation dans le tableau 6.3.

Simulation	Temps particulaire	Temps d'évaporation
ELD_{10}	$\tau_p = 2.43 \text{ ms}$	$\tau_{evap} = 1 \text{ ms}$
ELD_{32}	$\tau_p = 4.7 \text{ ms}$	$\tau_{evap} = 2.3 \text{ ms}$
$ELRR$	$\tau_p \in [2\mu s, 24.22 \text{ ms}]$	$\tau_{evap} \in [0s, 13.65 \text{ ms}]$

Table 6.3: Temps particuliers et temps d'évaporation pour les différentes simulations

1.3. 2) Nombres de Stokes

Le temps de relaxation particulaire est à mettre en relation avec le nombre de Stokes, défini comme le rapport du temps de relaxation particulaire et un temps caractéristique du fluide :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} = \frac{\frac{\rho_p d^2}{18\mu_g}}{\tau_f} \quad (6.3)$$

Le choix du temps fluide est délicat car les temps caractéristiques de l'écoulement turbulent swirlé sont nombreux. On propose de prendre le temps convectif de l'éq. 6.1, et le temps de rotation de l'éq. 6.2.

Simulation	Nombre de Stokes convectif	Nombre de Stokes de rotation
ELD_{10}	$St_{conv} = 0.32$	$St_{swirl} = 4$
ELD_{32}	$St_{conv} = 0.62$	$St_{swirl} = 7.83$
$ELRR$	$St_{conv} \in [3e^{-4}, 3.23]$	$St_{swirl} \in [4e^{-3}; 40.44]$

Table 6.4: Nombres de Stokes convectifs et de rotation dans les différentes simulations

Les valeurs obtenues pour chaque simulation sont reportées en table 6.4. On remarque que dans les cas monodisperses, St_{conv} est inférieur à 1 alors que St_{swirl} est supérieur à 1 : les particules sont inertielles par rapport à la rotation du fluide. Dans le cas $ELRR$, une gamme plus large est couverte.

2 Méthode numérique

2.1 Description du domaine numérique et des maillages

La Figure 6.4 présente le domaine de calcul utilisé dans cette étude. Il comporte tous les éléments de la géométrie expérimentale, du tube amenant l'air dans le plenum à la chambre de combustion carrée.

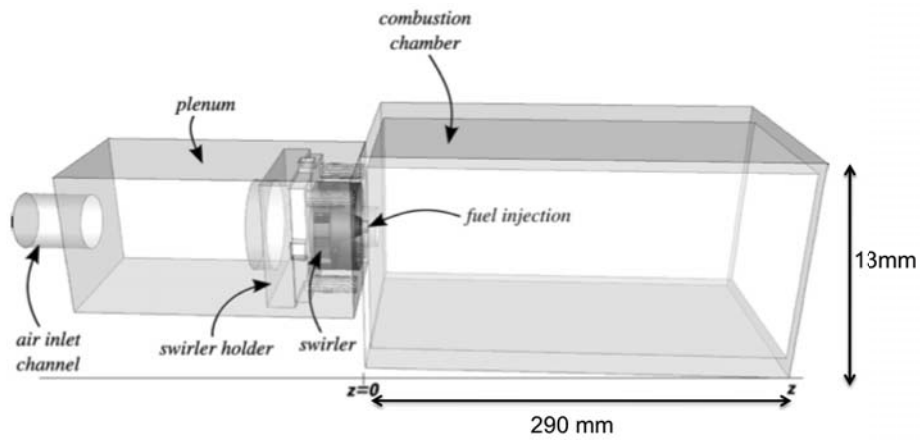


Figure 6.4: Géométrie du brûleur MERCATO

Le maillage est présenté en Fig. 6.5 et la zone raffinée autour de l'injecteur est présentée en Fig. 6.6 :

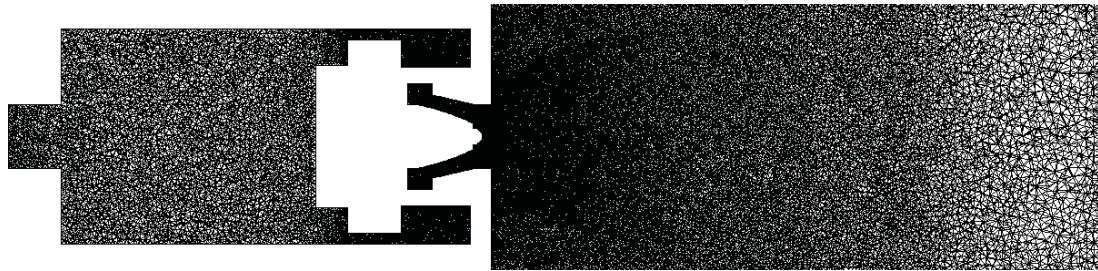


Figure 6.5: Coupes du maillage *mercEL* dans le plan médian

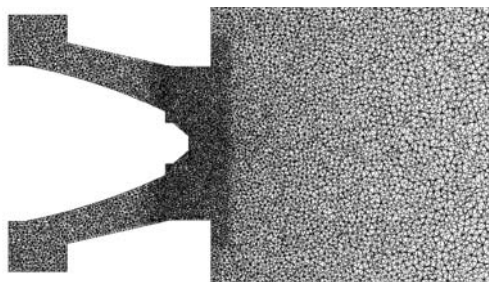


Figure 6.6: Coupe du maillage *mercEL* à l'injecteur dans le plan médian

Le Tableau 6.5 présente les caractéristiques du maillage *mercEL*.

Nombre de noeuds	2 101 341
Nombres de cellules	11 711 230
Taille de maille à l'injection	0.07 mm
Taille de maille dans la zone primaire	0.25 mm

Table 6.5: Caractéristiques du maillage *mercEL*

2.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour la phase gazeuse sont les mêmes dans tous les calculs. Des conditions NSCBC (Poinsot and Lele (1992)) sont utilisées pour l'entrée et la sortie. A l'entrée, le débit expérimental est imposé avec un profil de vitesse turbulent, compatible avec des conditions non glissantes utilisées pour toutes les parois de la géométrie. Pour la phase liquide, le modèle FIM-UR (chapitre 4) est utilisé. La distribution en diamètre varie selon le cas simulé comme rappelé dans le tableau 6.6. Un modèle de rebond élastique est utilisé aux parois.

Nom	Angle	Rayon de l'injecteur	Taille de gouttes
ELD_{10}	40 °	0.25 mm	31.35 μm
ELD_{32}	40 °	0.25 mm	44 μm
$ELRR$	40 °	0.25 mm	Rosin-Rammler (Fig. 6.3)

Table 6.6: Paramètres du modèle FIM-UR

Le Tableau 6.7 rappelle les données d'entrée pour les simulations pour la phase gazeuse.

Nom	Type
Entrée plenum	NSCBC débit imposé
Sortie	NSCBC
Murs	non glissants et adiabatiques

Table 6.7: Conditions aux limites

2.3 Initialisation

Avant d'injecter les gouttes, un écoulement gazeux est installé avec un pré-calcul de 8.5 ms. Puis des gouttes sont injectées pendant 1.5 ms. Enfin, on remplace une partie du volume d'air par des gaz brûlés afin d'initialiser une première flamme. L'obtention d'une flamme stationnaire dure environ 18 ms. Une fois la flamme obtenue, on moyenne pendant environ 22 ms.

Cette initialisation ne correspond cependant pas au processus réel d'établissement de la flamme stabilisée. En effet, expérimentalement, la carburation de la chambre a lieu pendant environ 1.5 s avant que le mélange ne soit allumé par une bougie. Ainsi, les zones de recirculation typiques de ces chambres swirlées sont remplies en fin de carburation. Cependant, ce temps physique de remplissage est hors de portée des calculs LES réalisés aujourd'hui dans des géométries complexes. On a privilégié ici une initialisation permettant d'atteindre rapidement un état stationnaire de flamme stabilisée.

2.4 Modèles utilisés

Les outils numériques les plus précis disponibles dans AVBP ont été utilisés dans ce travail. Le schéma TTGC a été utilisé pour simuler l'écoulement de la phase gazeuse avec un modèle de viscosité artificielle pour traiter les forts gradients (Colin (2000)). Le modèle de sous maille est le modèle WALE (Ducros et al. (1998)). La chimie à deux étapes 2S_KERO_BFER a été utilisée pour modéliser la combustion kérosène-air (section 4.2. 2) Franzelli et al. (2010)) en combinaison avec le modèle de flamme épaissie dynamique (Charlette et al. (2002)). L'épaississement s'effectue sur la deuxième réaction, et le senseur est centré sur la stoechiométrie. Le modèle d'évaporation utilisé est celui décrit dans la section 1.4. 3). Le choix du nombre de Prandtl Pr_{evap} et du nombre de Schmidt Sc_{evap} est délicat et peut avoir un impact important. Sierra (2012) propose d'utiliser les valeurs dans les gaz frais, évaluées avec CANTERA à $Pr_{evap} = 2.58$ et $Sc_{evap} = 0.710$ à ce point de fonctionnement.

3 Topologie de l'écoulement diphasique réactif

On présente les résultats obtenus dans les trois simulations.

3.1 Dynamique de la phase gazeuse

La structure des champs moyens de vitesse gazeuse axiale est identique pour les trois simulations. C'est pourquoi on ne présentera que les champs gazeux pour la simulation ELD_{10} . Les Figures 6.7, 6.8 et 6.9 présentent les champs de vitesse axiale moyenne, axiale RMS et tangentielle moyenne pour le cas ELD_{10} dans le plan médian. Qualitativement, la zone de recirculation centrale (IRZ) est décomposée en deux parties : une partie proche injecteur avec de fortes amplitudes de vitesses, et une partie secondaire avec des vitesses axiales plus faibles. Les zones de recirculation de coin sont elles aussi présentes, mais contrairement au cas non réactif, elles sont décalées en aval de la chambre et écrasées sur les parois. Finalement, on note l'existence d'une couronne de petites zones de recirculation en sortie de swirler à l'intersection avec les murs de la chambre (SRZ) (Fig 6.7) de part et d'autre de la sortie de l'injecteur dans la chambre. Cette zone va jouer un

grand rôle dans la stabilisation de la flamme. Les zones de fortes fluctuations apparaissent dans les zones d'interaction entre la zone de recirculation centrale et le jet sortant du swirler, indiquant un fort cisaillement dans cette zone. Les zones de part et d'autre de l'injecteur pilote sont elles aussi sujettes à de fortes fluctuations. Le champ de vitesse tangentielle montre la forte axisymétrie de la chambre.

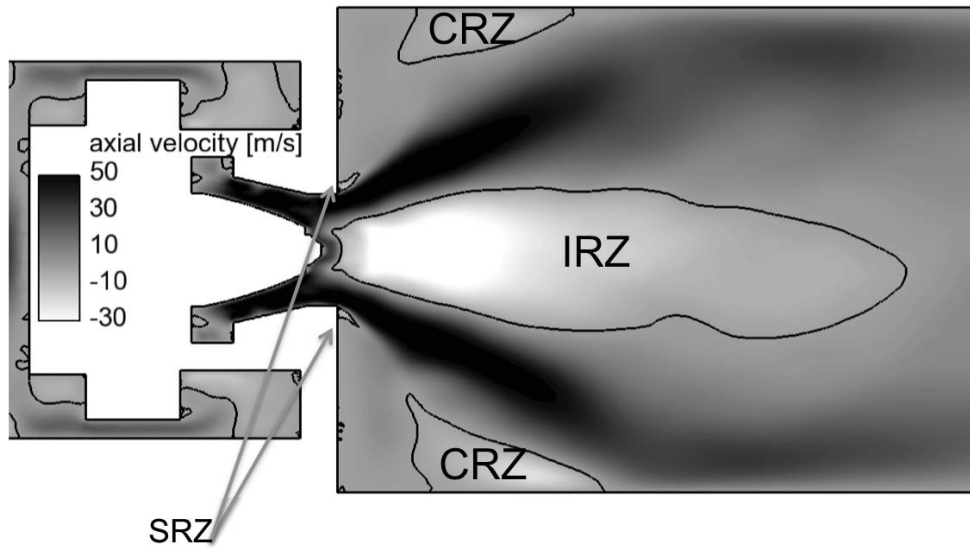


Figure 6.7: Champ de vitesse axiale gazeuse moyenne dans le plan médian : cas ELD_{10}

Les Fig. 6.10 et Fig 6.11 montrent la comparaison des profils de vitesses axiales moyennes et RMS gazeuse dans les 4 sections avec les mesures expérimentales. Un bon accord tant sur la structure globale du jet que sur l'amplitude des vitesses moyennes et fluctuantes est obtenu. Les trois calculs présentent des profils très similaires, ce qui semblent indiquer que le spray a un faible impact sur l'écoulement gazeux.

D'une part, on observe, qu'en proche injection, la zone de recirculation est plus intense dans l'expérience. D'autre part, l'angle d'ouverture du jet est légèrement surestimé, cette surestimation étant transportée en aval de la chambre.

En termes de fluctuations axiales gazeuses, on observe également un bon accord. Les amplitudes de fluctuations sont bien captées tout au long de la chambre. Conformément à la surprédiction de l'ouverture du jet notée en Fig. 6.10, la largeur du pic est surestimée à $x = 10 \text{ mm}$. En $x = 26 \text{ mm}$, cette observation reste vraie pour le cas ELD_{32} et $ELRR$ mais est moins marquée pour ELD_{10} , ce qui laisse supposer que le diamètre moyen D_{32} caractérise mieux la distribution polydisperse en ce qui concerne la dynamique. Les profils de vitesse axiale fluctuantes sont semblables plus en aval pour les trois calculs.

Au vu de ces comparaisons quantitatives, l'accord entre les trois calculs et les mesures est

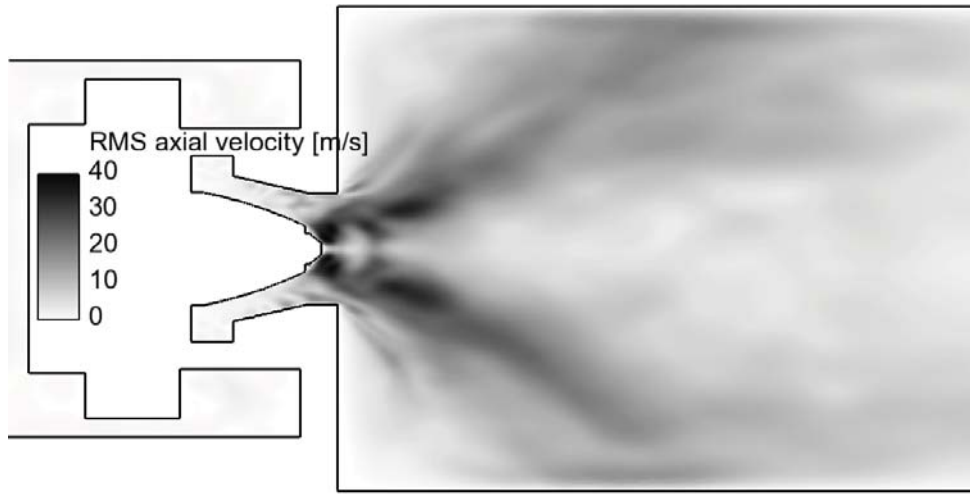


Figure 6.8: Champ de fluctuations de vitesse axiale gazeuse dans le plan médian : cas ELD_{10}

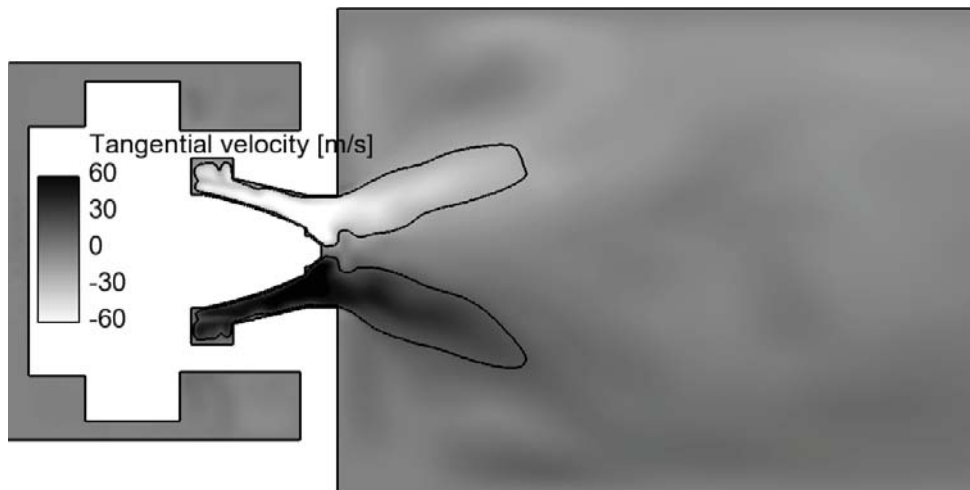


Figure 6.9: Champ de vitesse tangentielle moyenne gazeuse dans le plan médian : cas ELD_{10}

suffisant pour permettre l'analyse de la phase liquide (section 3.2) puis de la structure de flamme (section 3.3).

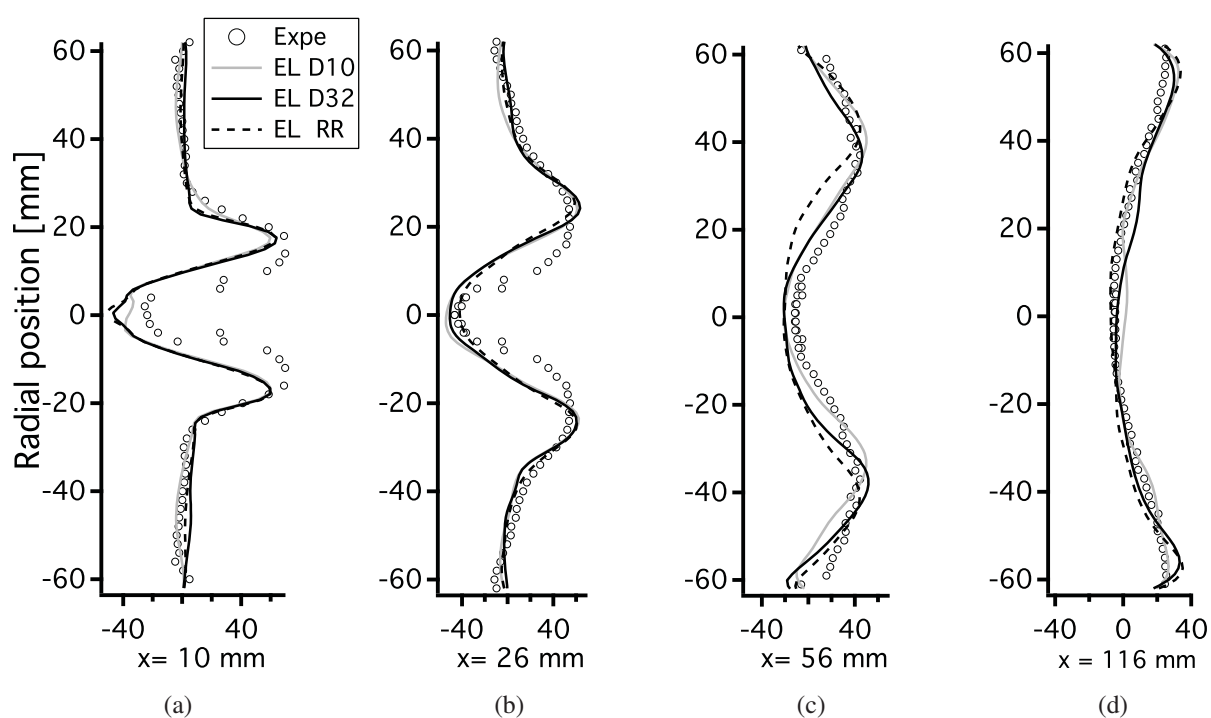


Figure 6.10: Profils de vitesse gazeuse axiale moyenne dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté)

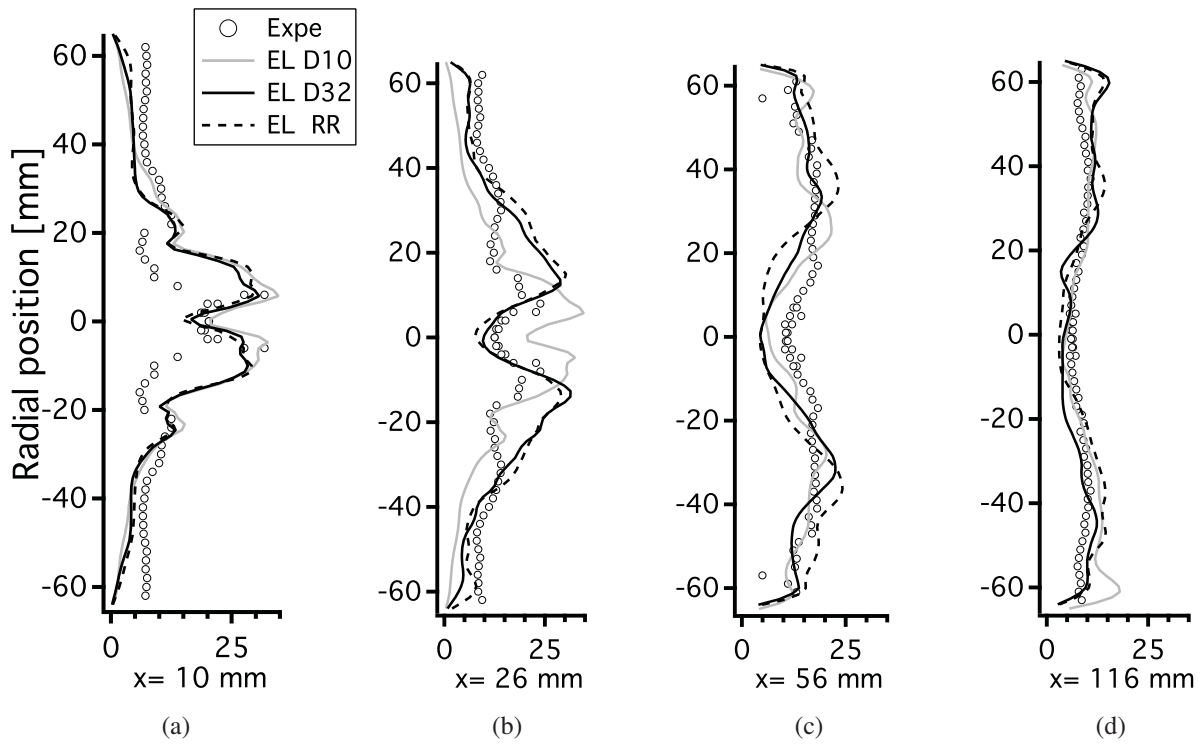


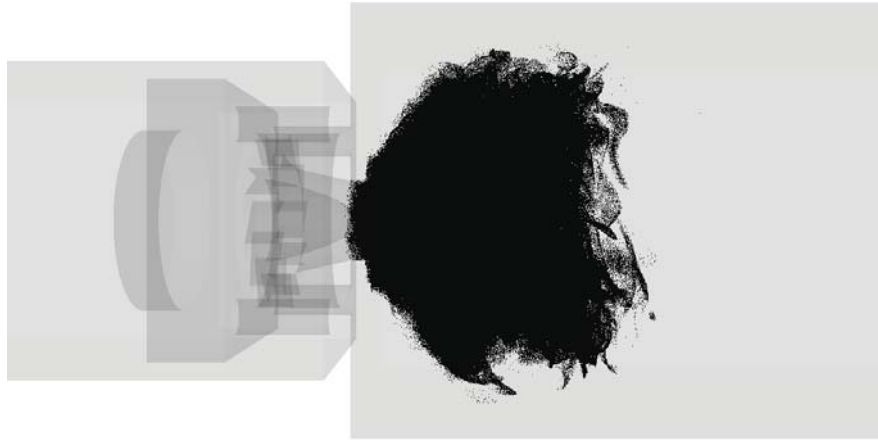
Figure 6.11: Profils de vitesse gazeuse axiale fluctuante dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté)

3.2 Dynamique de la phase liquide

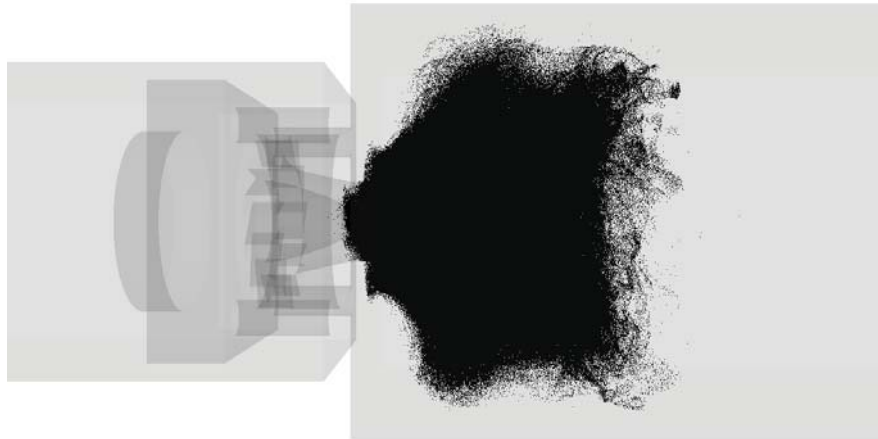
Pour obtenir des champs moyens des grandeurs liquides, il est nécessaire de projeter les solutions Lagrangiennes sur le maillage pour les convertir en solutions Eulériennes. Néanmoins pour étudier directement la statistique Lagrangienne, on propose de superposer des séries de distributions instantanées de particules (Fig. 6.12). Pour cela, une fois une flamme stabilisée, on stocke un ensemble de solutions Lagrangiennes. Puis, on superpose dans l'espace, ces solutions afin d'obtenir une phase Lagrangienne. Les moyennes et statistiques présentées dans cette section sont obtenues sur un intervalle de 23 ms de temps physique.

La Figure. 6.12 illustre la statistique Lagrangienne pour les trois simulations. Pour le cas ELD_{10} , la phase liquide occupe une zone courte et compacte et le cône est bien défini, alors que la structure du cas ELD_{32} est moins compacte : le liquide va plus loin dans la chambre, et certaines gouttes semblent plus susceptibles d'être capturées dans les zones de recirculation de coin. Enfin le cas $ELRR$ présente un comportement encore différent : un cône est lui aussi défini mais la longueur de la zone liquide est bien plus grande du fait de la gamme de nombre de Stokes plus étalée dans la simulation polydisperse. A partir de cet ensemble de réalisations, la longueur moyenne du spray est évaluée. Pour ELD_{10} , le spray a une longueur moyenne de 68 mm alors que pour ELD_{32} , cette longueur vaut 79mm, différence expliquée par un nombre de Stokes plus important mais aussi par un temps d'évaporation plus long. Cette longueur de spray explique aussi pourquoi on ne trouve pas de profils de vitesse à $z = 116 \text{ mm}$ en Fig 6.13 pour ELD_{10} et ELD_{32} . La longueur du spray de $ELRR$ est elle bien plus grande puisqu'elle vaut 130mm : résultat des nombres de Stokes et les temps d'évaporation plus variés dans cette simulation. Dans ce cas, on peut évaluer un profil de vitesse axiale liquide à $z = 116 \text{ mm}$.

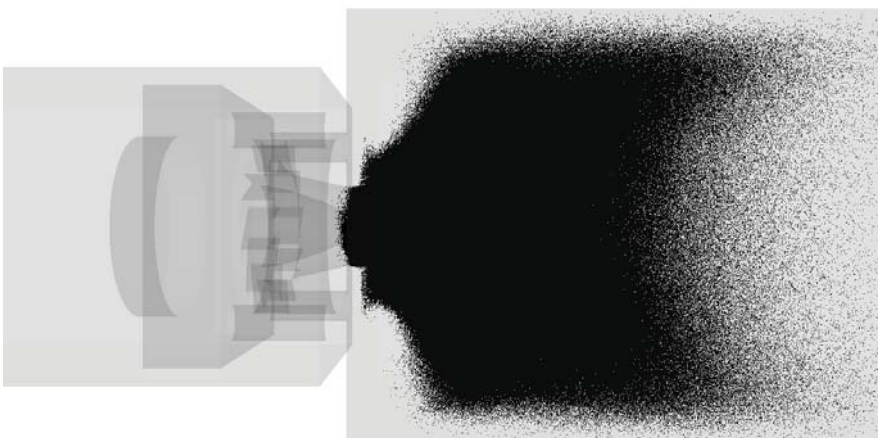
Une comparaison des profils de vitesses axiales liquides est donnée en Fig. 6.13. La structure est commune aux trois différentes simulations, le maximum d'amplitude étant localisé comme dans l'expérience, mais relativement plus faible. La simulation ELD_{10} est la plus en accord avec l'expérience, en proche injection, et à 26 mm. Les simulations $ELRR$ et ELD_{32} sont plus éloignées des mesures mais retrouvent un bon accord à 56 mm. A $z = 116 \text{ mm}$, les gouttes ont totalement disparu dans les simulations ELD_{10} et ELD_{32} , alors que la simulation $ELRR$ rejoint les valeurs de l'expérience. Les deux simulations $ELRR$ et ELD_{32} donnent des résultats très proches, ce qui semble indiquer que le diamètre D_{32} est celui qui représente le mieux la distribution polydisperse dans cette configuration. Ce résultat est à rapprocher des conclusions du Chapitre 5, où le D_{32} a été identifié comme le plus représentatif d'un spray évaporant. La dynamique du spray dans MERCATO en réactif est donc fortement contrôlée par l'évaporation via la flamme diphasique.



(a) ELD_{10}



(b) ELD_{32}



(c) $ELRR$

Figure 6.12: Illustration de la statistique Lagrangienne par superposition des champs instantanés de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$

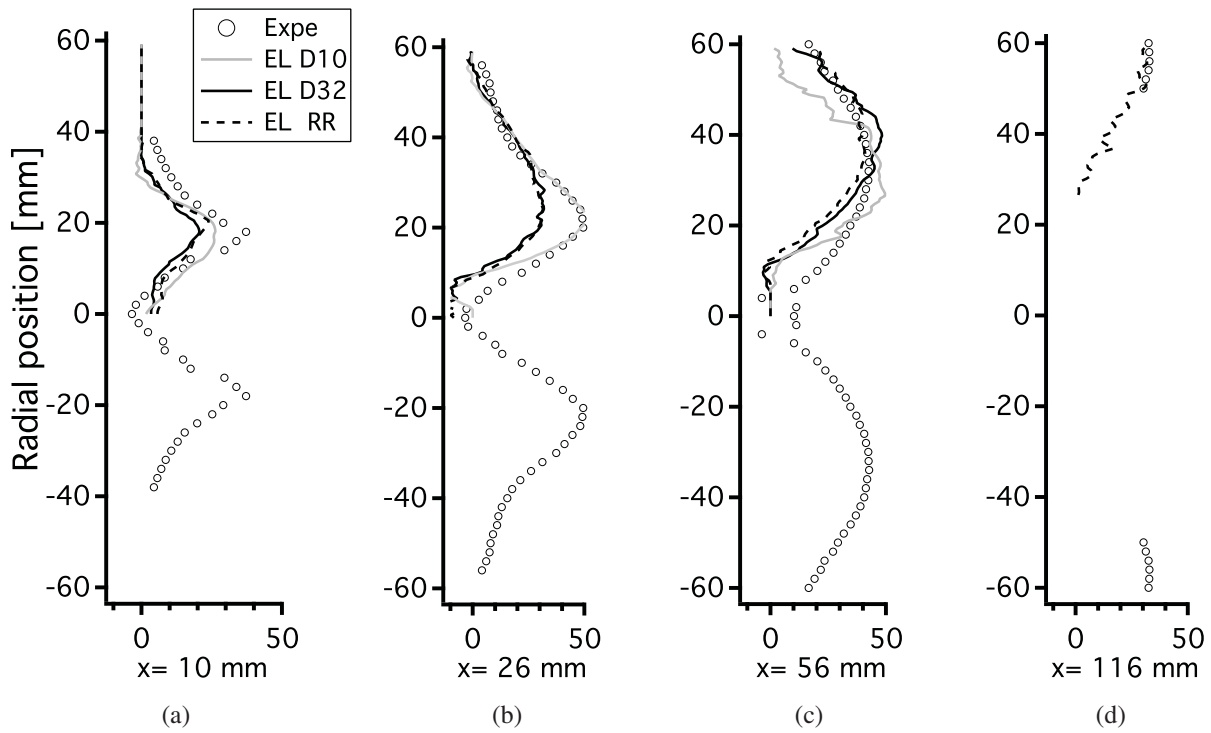


Figure 6.13: Profils de vitesse liquide axiale moyenne dans les 4 sections expérimentales. Comparaisons entre expériences (symboles), ELD_{10} (trait continu clair), ELD_{32} (trait continu foncé), $ELRR$ (trait tireté) ; en $x = 116$ mm, il n'y pas de gouttes dans les simulations ELD_{10} et ELD_{32} pour évaluer une vitesse liquide.

3.3 Interaction spray-flamme

3.3. 1) Structure de l'écoulement diphasique réactif

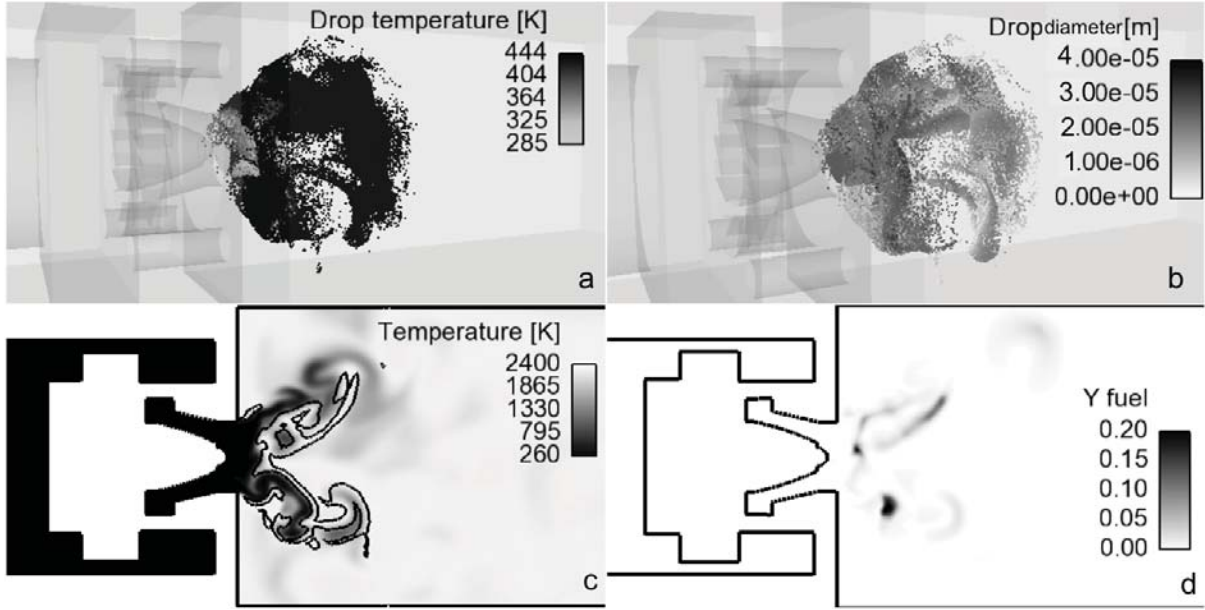


Figure 6.14: Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur dans le plan médian (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux dans le plan médian (d) . Cas ELD_{10}

La Figure 6.14 présente des champs instantanés de température liquide, de diamètre de gouttes, de température gazeuse et de fraction massique de carburant dans le plan médian. Les particules sont injectées avec un diamètre initial $D_{10} = 31.35\mu m$, et leurs températures augmentent vite jusqu'à la température d'équilibre $T_{eq} = 444 K$, dans les gaz chauds, résultat de la combustion d'un mélange kérosène-air à $\phi = 0.95$, à une température proche de $T = 2400 K$. On observe que la phase dispersée est très hétérogène, due à une forte interaction avec le Precessing Vortex Core (PVC), structure cohérente classique des écoulements swirlés, et observée dans ces calculs réactifs. La flamme est fortement plissée par l'écoulement issu du swirler. Elle est accrochée de part et d'autre de l'injecteur par les SRZ, à cause des conditions adiabatiques aux murs. La flamme forme deux branches, mais elle est aussi ancrée par un point de stagnation situé le plus en amont de l'IRZ. Les gouttes n'évaporent pas directement après leur injection. C'est finalement dans le front de flamme qu'elles s'évaporent partiellement pour générer du carburant. Ce carburant se retrouve derrière le front de flamme avec des gouttes, dans les gaz brûlés.

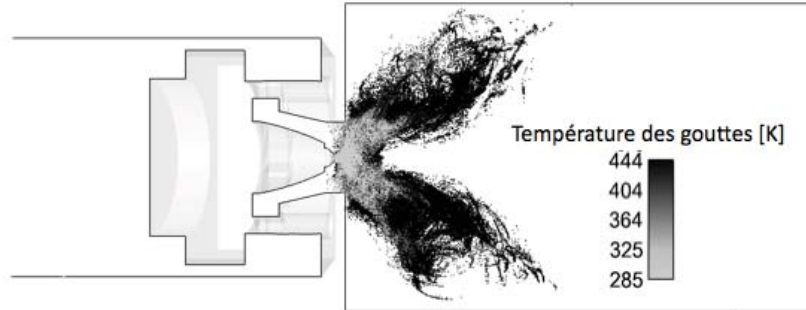
3.3. 2) Distribution des gouttes dans la chambre

En colorant par leur température les particules obtenues par superposition des distributions instantanées, représentées pour une tranche de 1 mm dans le plan médian sur la Fig 6.15, on observe que quelle que soit la simulation, les gouttes, injectées à 285 K, atteignent très vite leur température d'équilibre à 444 K.

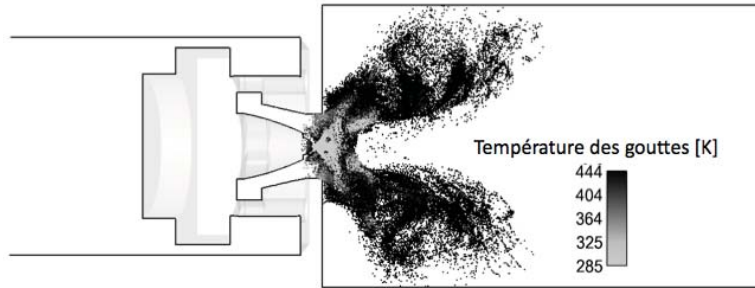
La Fig 6.16 présente les mêmes particules une tranche de 1 mm dans le plan médian colorées par leur diamètre. Pour les simulations ELD_{10} et ELD_{32} , les gouttes sont bien injectées à leur diamètre initial, respectivement $31.35 \mu m$ et $44 \mu m$, et finissent par être évaporées, alors que le comportement de $ELRR$ est plus hétérogène du fait des différentes tailles de gouttes. Néanmoins, on remarque que la partie dense du cône de gouttes en proche injecteur est composée de gouttes de grande taille, alors que la partie du cône plus en aval de la chambre est plus diffuse.

La Figure 6.17 présente la position axiale des gouttes en fonction du diamètre d'injection pour une solution instantanée. Dans les cas monodisperses, il y a un diamètre d'injection unique et le tracé donne la valeur maximale de position axiale des gouttes. On retrouve des gouttes de diamètre initial D_{32} plus en aval de la chambre que dans le cas ELD_{10} , du fait de leur plus grande inertie et de leur temps d'évaporation plus long. Dans le cas $ELRR$, on constate une distribution assez homogène et une tendance croissante, c'est-à-dire que les petites gouttes restent proches de l'injecteur alors que les grosses gouttes sont retrouvées très en aval dans la chambre du fait de leur grande inertie. On estime la longueur de la flamme moyenne $L_f = 70mm$; ainsi on constate que 10% des gouttes vont au delà de la flamme pour la simulation polydisperse.

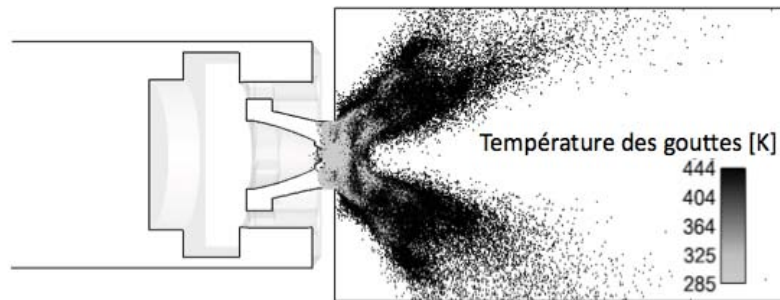
Suite à ces différentes répartitions spatiales de gouttes dans la chambre, on s'intéresse à la distribution de carburant gazeux en Fig. 6.18. Pour les trois simulations, on observe d'une part, une même structure en M du carburant gazeux dans la chambre, qui est dans l'axe du spray injecté dans la chambre, et d'autre part, un point de vapeur de carburant riche ($\phi = 2$), dans l'axe central de l'injecteur, au point le plus haut de la zone de recirculation centrale. La similarité des champs de vapeur de kérosène dans la chambre nous pousse à regarder les bilans de masse totale, liquide et gazeuse dans la chambre.



(a) ELD_{10}



(b) ELD_{32}



(c) $ELRR$

Figure 6.15: Gouttes colorées par leur température dans une tranche de 1 mm dans le plan médian, obtenues par superposition des distributions instantanées de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$

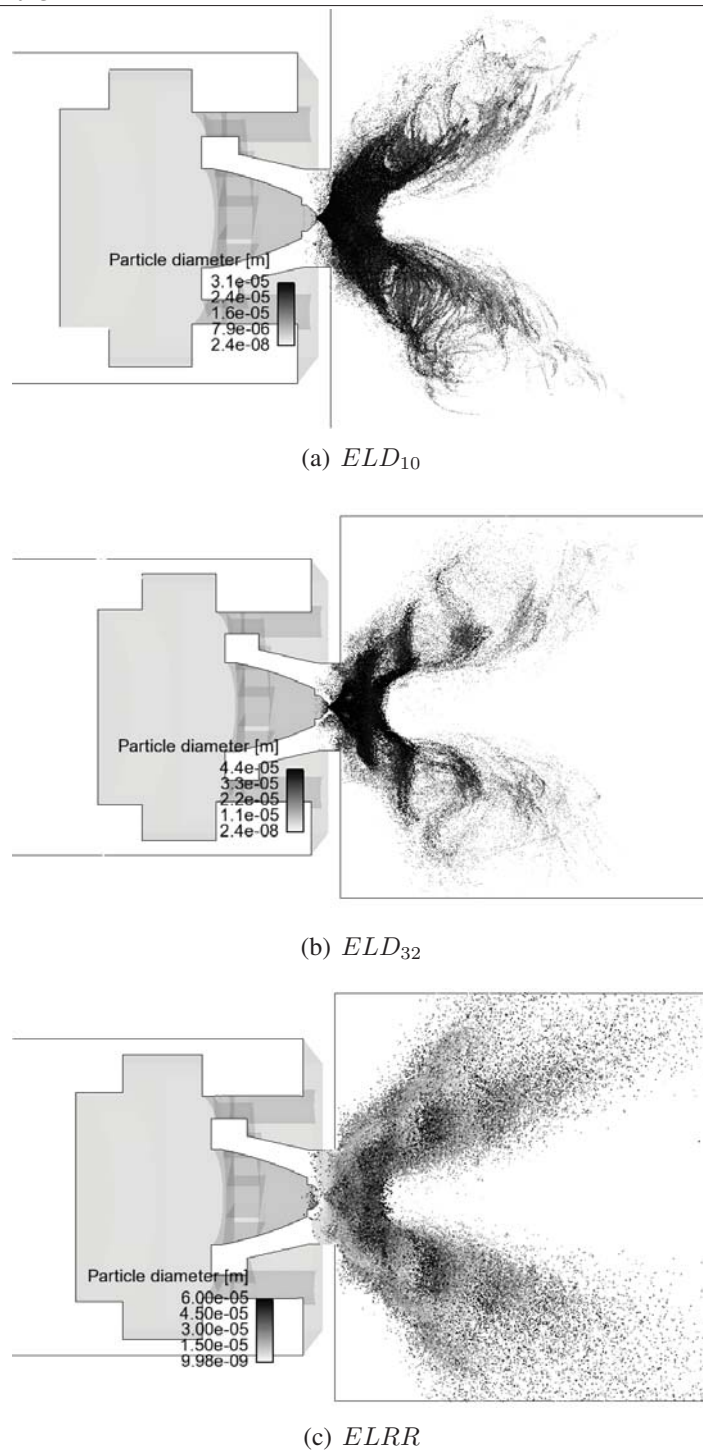


Figure 6.16: Gouttes colorées par leur diamètre dans une tranche de 1 mm dans le plan médian, obtenues par superposition des distributions instantanées de particules : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} et (c) $ELRR$

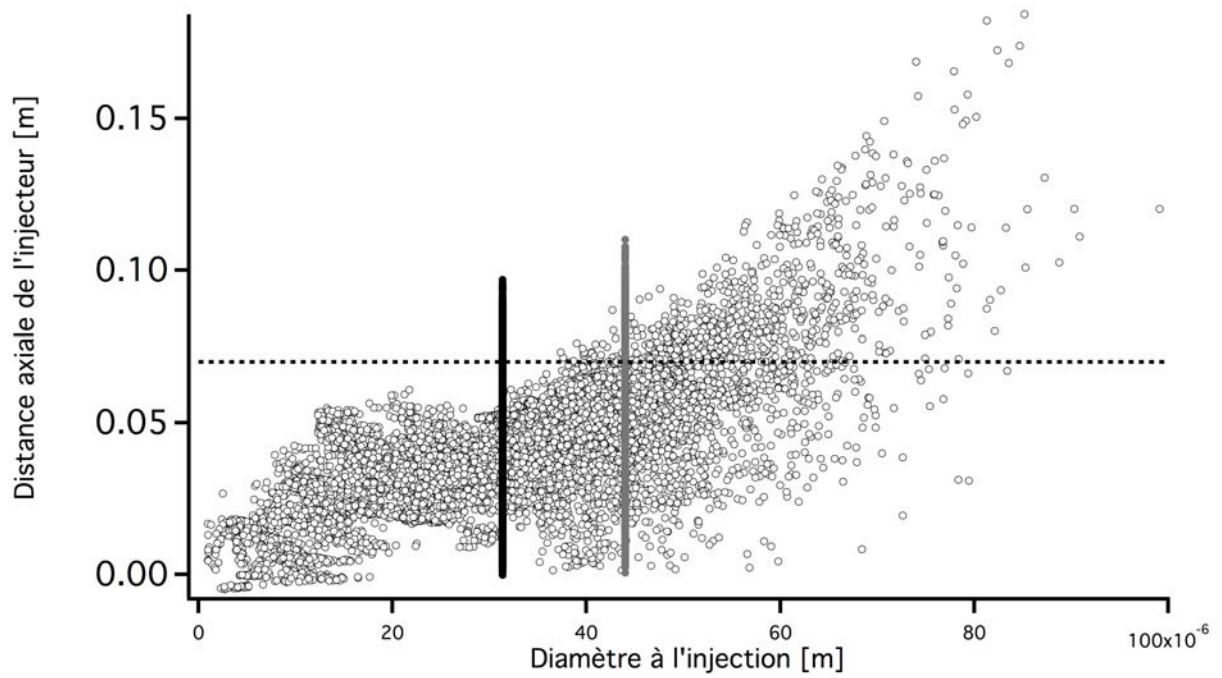


Figure 6.17: Distance de pénétration des gouttes en fonction de leur diamètre d'émission à l'injection dans une solution instantanée : ELD_{10} en trait noir ELD_{32} en trait gris ; $ELRR$ en symboles ; le trait pointillé représente la longueur de flamme moyenne

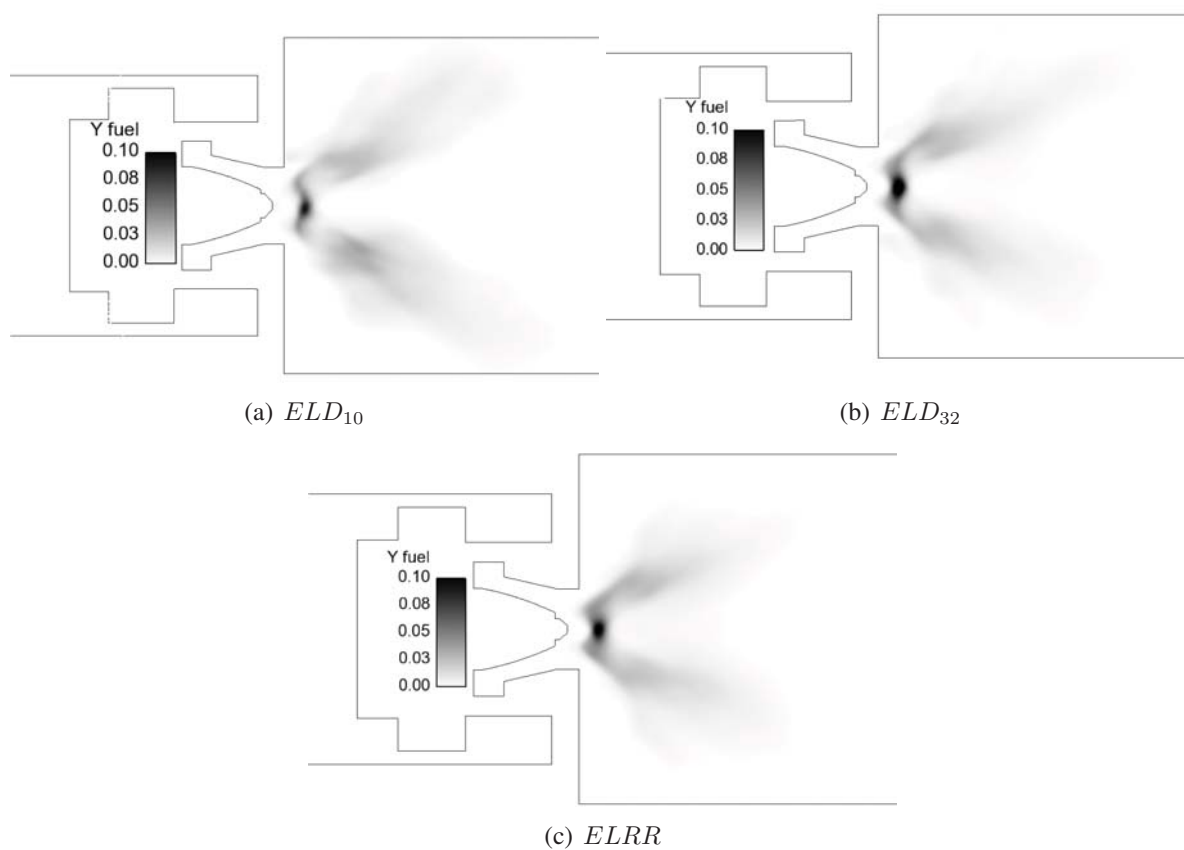


Figure 6.18: Comparaison des champs moyens de fraction massique de kérosène dans le plan médian : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} , (c) $ELRR$

3.3. 3) Bilans de masse de kérosène gazeux et liquide

Une façon d'évaluer l'interaction entre le spray et l'écoulement gazeux est de comparer l'évolution temporelle du bilan de masse de kérosène gazeux, liquide et total dans les trois simulations (Fig. 6.19 et table 6.8). Si la masse de carburant reste la même dans les 3 cas ($5 \mu g$ dans la chambre), la proportion de liquide est plus grande dans le cas polydisperse que dans les cas monodisperses (du fait des grosses gouttes qui ont un temps d'évaporation plus long), et plus grande dans le cas ELD_{32} que dans le cas ELD_{10} , ce qui est cohérent avec les temps d'évaporation des diamètres injectés dans les deux cas.

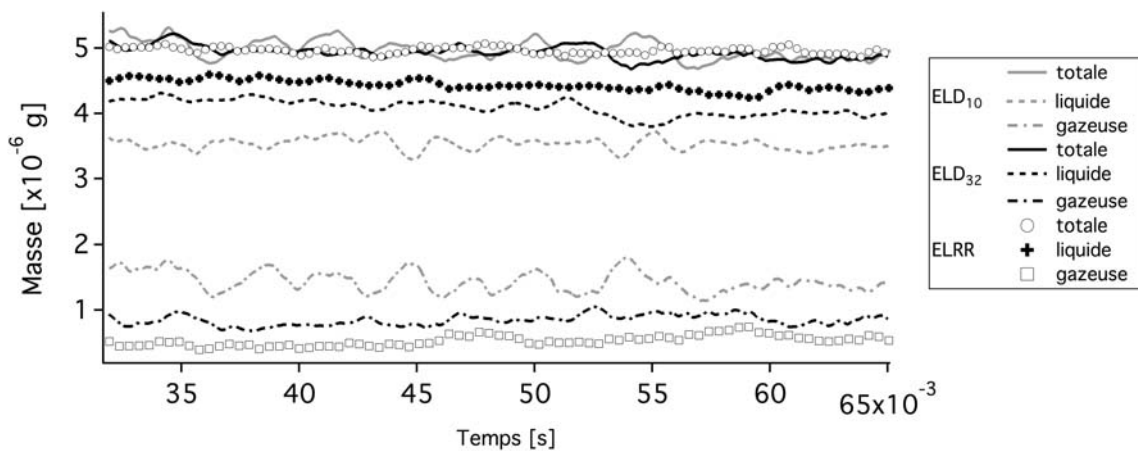


Figure 6.19: Evolution temporelle de masse totale de carburant, masse liquide et masse gazeuse : comparaisons entre les cas ELD_{10} (lignes grises) , ELD_{32} (lignes noires) , et $ELRR$ (symboles)

	Nombre de gouttes moyen	Masse liquide	Masse gazeuse
ELD_{10}	380 000	$3.5 e^{-6}$ kg soit 72%	$1.5 e^{-6}$ kg soit 28%
ELD_{32}	180 000	$4 e^{-6}$ kg soit 80%	$1 e^{-6}$ kg soit 20 %
$ELRR$	210 000	$4.5 e^{-6}$ kg soit 90%	$0.5 e^{-6}$ kg soit 10%

Table 6.8: Comparaison du nombre de gouttes moyen, de la masse liquide moyenne et masse gazeuse moyenne de carburant pour les trois simulations

3.3. 4) Topologie de la flamme

La Figure 6.20 présente les champs moyens de dégagement de chaleur dans le plan médian pour les trois simulations avec une isoligne de fraction volumique liquide ($\alpha_l = 1e^{-5}$), et une visualisation de la flamme issue de l'expérience reconstruite par transformée d'Abel (Fig 6.20 (d)) . Dans les trois calculs, on observe une flamme en M, avec une zone réactive très intense dans l'axe, en aval de l'injecteur. La flamme est dans les trois cas attachée en sortie de swirler, grâce aux zones de recirculation (SRZ) remarquées dans la Fig. 6.7. Ces points d'ancrage sont liés à la condition adiabatique des murs. L'expérience étant refroidie au cours du temps, il sera important dans les calculs futurs (ce n'est pas le cas dans cette thèse) de prendre en compte la non adiabaticité des murs. La flamme similaire dans les 3 cas est cohérente avec les champs moyens de fraction massique de carburant en Fig. 6.18. On constate une même structure en M, avec une plus forte concentration dans l'axe de l'injecteur où une richesse proche de 2 est atteinte. Le spray est bien injecté sous la forme d'un cône creux, et ne remplit pas la zone de recirculation centrale. La zone réactive est globalement homogène dans le cas ELD_{10} , alors qu'on note deux zones globalement plus réactives dans le cas $ELRR$: d'une part la flamme en sortie d'injecteur alimentée davantage que les deux autres cas grâce aux plus petites gouttes du spray polydisperse, d'autre part une zone dans la direction du spray, plus en aval, alimentée par des gouttes plus grosses de la distribution. Cette deuxième zone plus intense apparaît également, certes moins marquée, dans le cas ELD_{32} . Bien que la visualisation directe expérimentale soit qualitative, on note une forme similaire dans les calculs et l'expérience. Les mesures montrent une flamme en M, avec une zone réactive dans l'axe de la chambre en aval de l'injecteur et une deuxième zone en aval du spray. La première zone semble cependant positionnée plus proche de l'injecteur d'une part, et plus large d'autre part. La deuxième zone ne semble pas autant alignée que dans les calculs avec le spray, et n'est pas accrochée en sortie de swirler. Par ailleurs, la flamme semble plus longue, plus large et l'angle formé par le spray plus petit que dans les calculs. Dans les deux cas, on note bien la présence d'un spray dense, et d'une zone réactive centrale, au point le plus en amont de la zone de recirculation centrale. Aucune autre mesure n'étant disponible pour évaluer la pertinence des résultats obtenus, on propose de comparer les trois calculs en termes de structures de flamme (section 4).

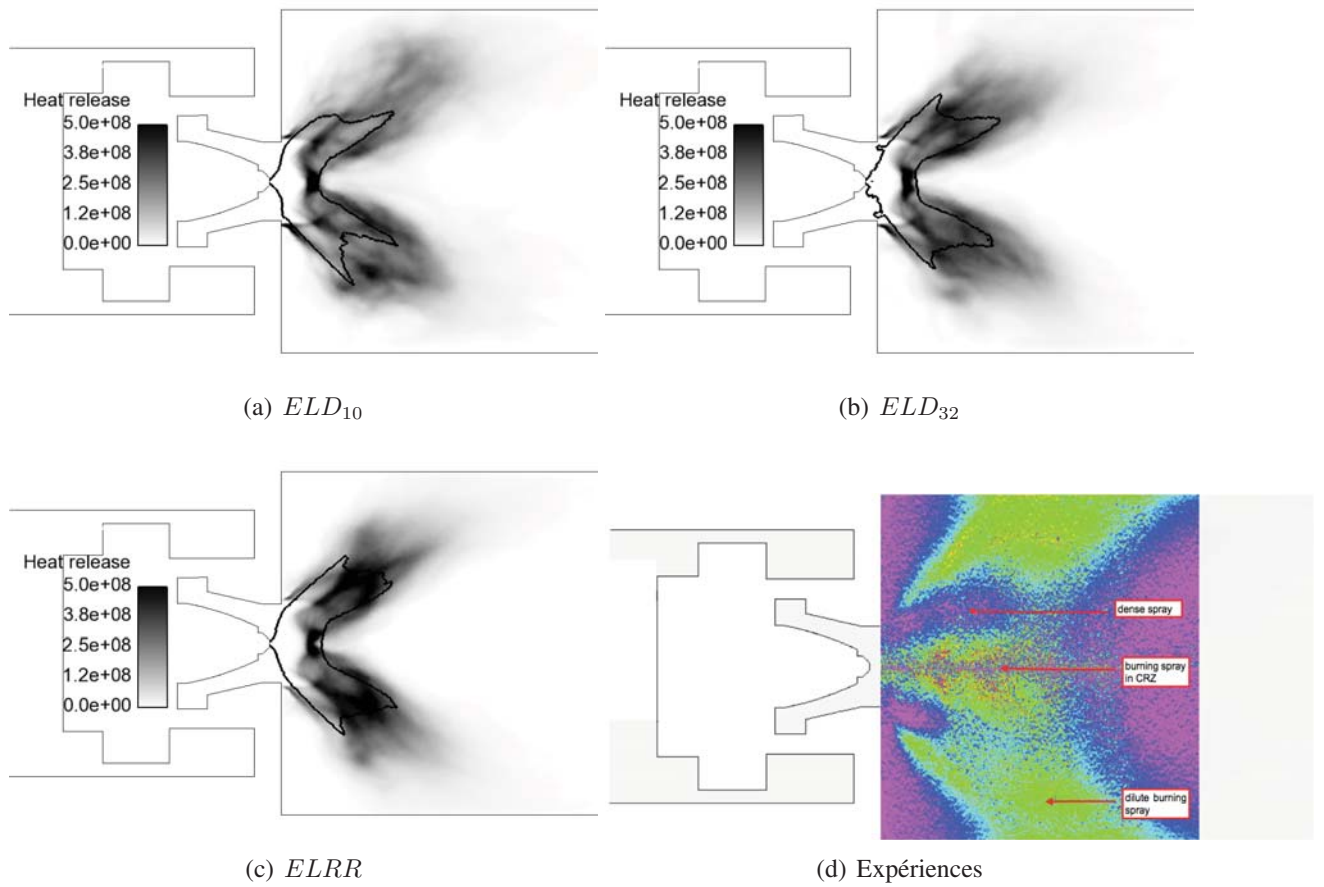


Figure 6.20: Comparaison des champs moyens de dégagement de chaleur dans le plan médian avec isoligne de fraction volumique liquide ($\alpha_l = 1e^{-5}$) : (a) ELD_{10} , (b) ELD_{32} , (c) $ELRR$ et (d) visualisation directe de la flamme (Linassier et al. (2011))

4 Structure de flamme

Dans cette section, la structure de flamme produite par les 3 calculs est analysée. Les champs instantanés dans le plan médian sont donnés à titre d'exemple pour le cas ELD_{10} , et les trois cas sont comparés quantitativement, en termes de distribution. Cette partie cherche à évaluer la structure de flamme diphasique, plus particulièrement le régime de combustion. Cette structure étant commune aux 3 simulations, les images des champs ne sont détaillées que dans le cas ELD_{10} , les cas ELD_{32} et $ELRR$ sont donnés en annexe 6. Une étude plus quantitative compare ensuite les différents cas.

4.1 Analyse qualitative

Pour analyser cette structure de flamme complexe, on utilise l'indice de Takeno ([Yamashita et al. \(1996\)](#)), défini comme :

$$Takeno = \nabla Y_F \otimes \nabla Y_{Ox} \quad (6.4)$$

où l'opérateur ∇ définit le gradient spatial, \otimes définit le produit scalaire et Y_F et Y_{Ox} sont les fractions massiques de carburant gazeux et d'oxydant. Afin de le représenter uniquement dans les zones réactives, on propose d'utiliser un indice de Takeno réactif, conditionné par la valeur absolue du dégagement de chaleur :

$$Takeno^* = \nabla Y_F \otimes \nabla Y_{Ox} * |HR| \quad (6.5)$$

où HR est le dégagement de chaleur.

La Figure 6.21 présente des champs instantanés d'indice Takeno réactif, de gouttes, de fraction massique de kérosène gazeux et de fraction massique de dioxygène dans le plan médian. On note une flamme plissée, où les régimes de combustion (prémélange et diffusion) sont difficiles à distinguer. Néanmoins, on distingue deux zones :

- les zones blanches, qui correspondent à une flamme de prémélange ($\phi \in [0.5; 2]$). Ces zones correspondent à des régions où les gouttes forment du kérosène gazeux après évaporation qui se mélange avec l'air du swirler pour brûler en prémélange. On les distingue plus en détail en Fig. 6.22 en aval de l'injecteur proche de l'axe de la chambre d'une part, et dans l'axe du spray plus en aval d'autre part.
- les zones noires correspondent aux flammes de diffusion détaillées en Fig 6.23. Elles correspondent aux régions où les gouttes forment des poches dans les gaz chauds où elles continuent de s'évaporer et génèrent du carburant qui brûle en diffusion.

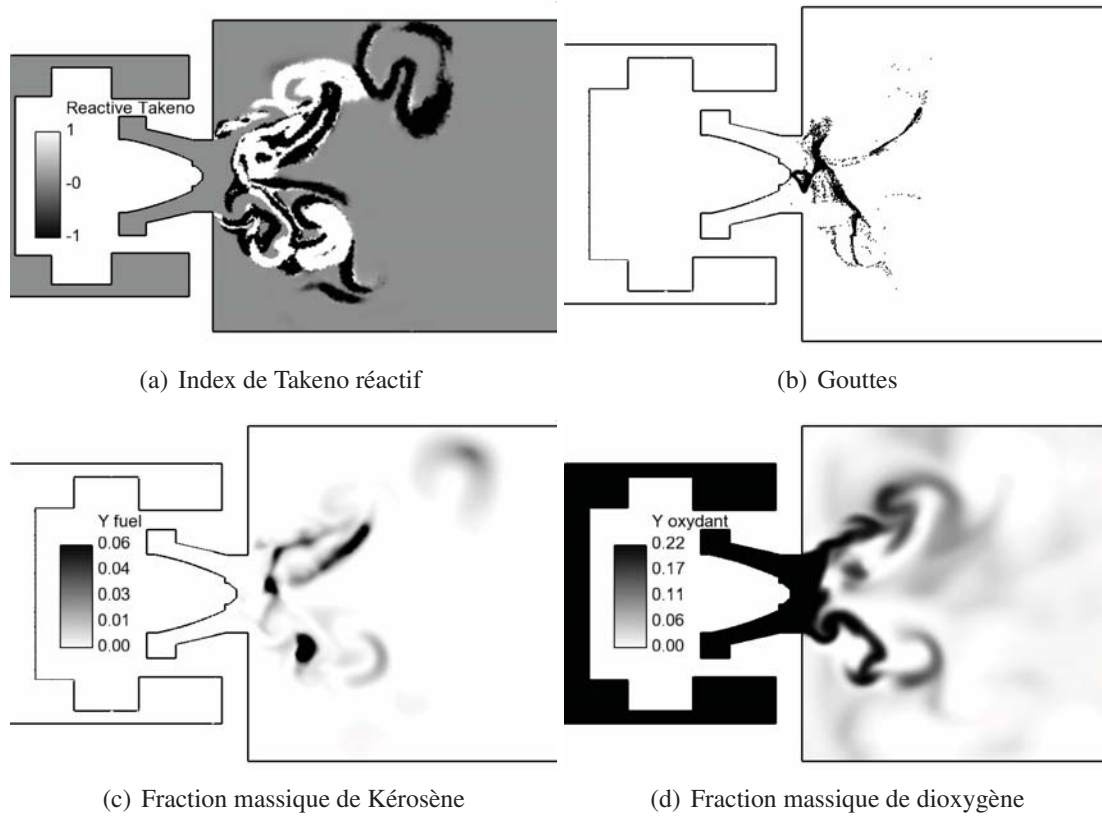


Figure 6.21: Champs instantanés de Takeno (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas ELD_{10}

La Fig 6.24 détaille une zone où les deux régimes coexistent. La nappe liquide forme une mince interface en Fig 6.24 (b), qui génère une forte concentration de kérosène gazeux, en Fig 6.24 (c). Dans cette zone, le taux de dioxygène est très faible (Fig 6.24 (d)). L'indice de Takeno est donc principalement négatif, caractéristique d'un régime de combustion en diffusion de la poche, bien qu'à l'intérieur, on observe une combustion en prémélange.

Une façon plus quantitative d'analyser les structures de flamme consiste à tracer des distributions de grandeurs caractéristiques en fonction de la composition du mélange (Burke and Schumann (1928)).

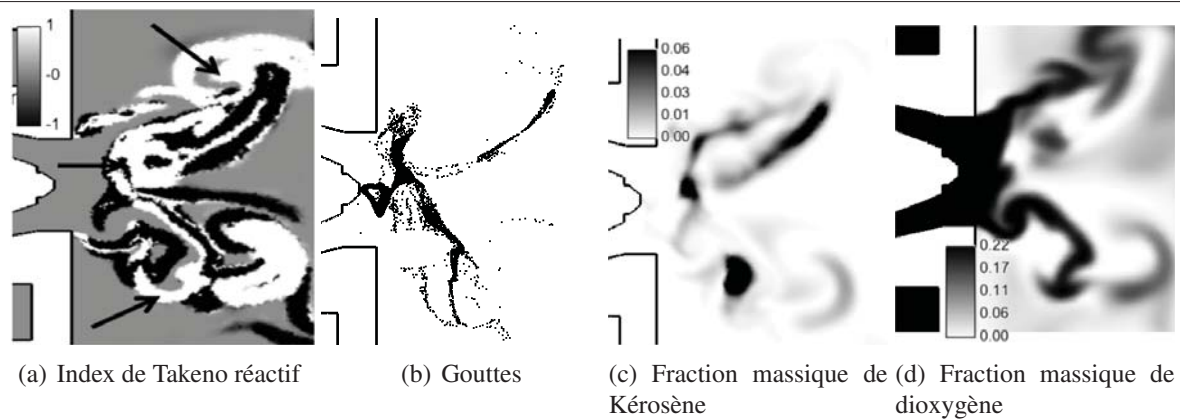


Figure 6.22: Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a), champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones blanches de prémélange

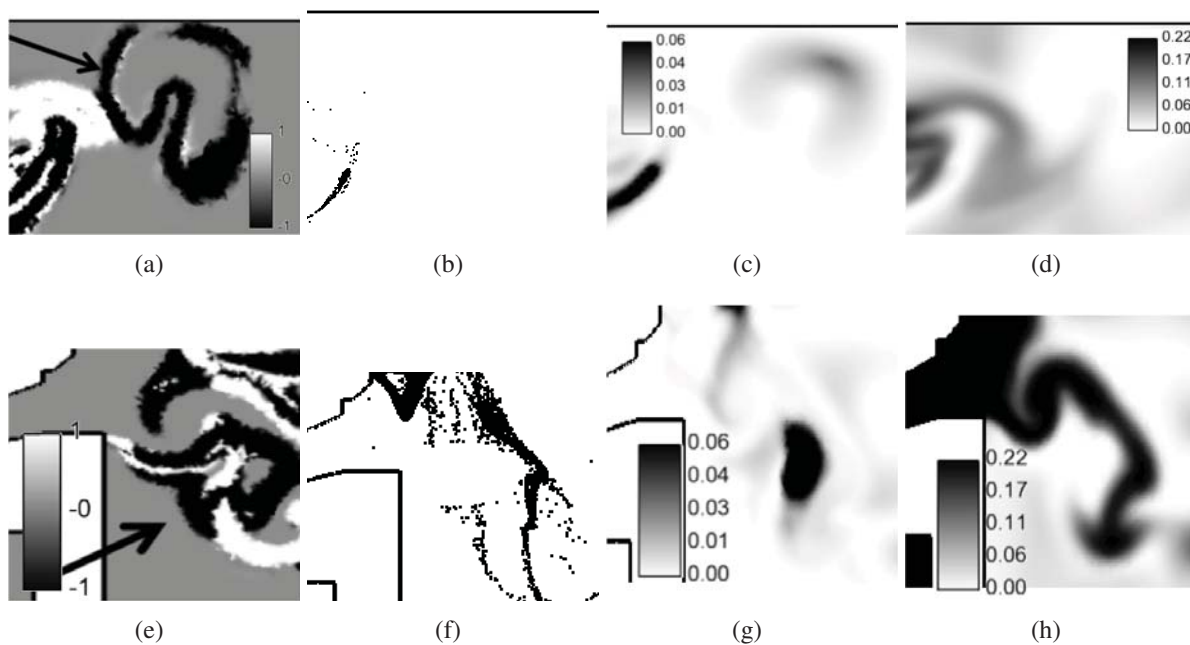


Figure 6.23: Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a), champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones noires qui brûlent en diffusion

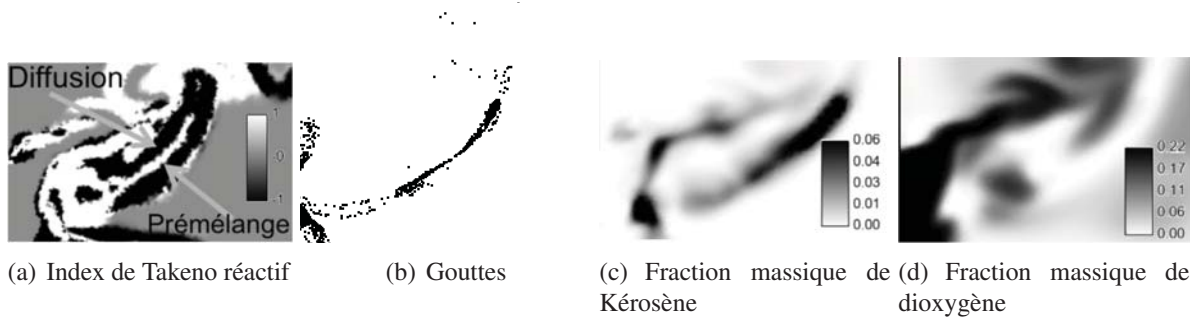


Figure 6.24: Zoom proche injection des champs instantanés de Takeno (a), champs de gouttes (b), fraction massique de kérosène (c) et oxygène (d). Cas ELD_{10} . Les flèches indiquent les zones de combustion prémélangée et de diffusion

4.2 Analyse quantitative

On définit tout d'abord la fraction de mélange :

$$z = \frac{Y_C - Y_C^O}{Y_C^F - Y_C^O} \quad (6.6)$$

Cette fraction de mélange est basée sur Y_C , qui est la fraction massique de carbone C , les exposants O et F référant au côté oxydant pur et au côté carburant pur respectivement. Dans notre cas, Y_C^O est nul et $Y_C^F = 0.845$. La fraction de mélange varie donc de 0 dans l'air pur (pas de carbone) à 1 dans le kérosène pur.

La Figure 6.25 (a) présente une distribution instantanée de dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange pour le cas ELD_{10} . La majorité du dégagement de chaleur se produit dans la plage de richesse $\phi \in [0.5; 2]$ centrée sur la stoechiométrie ($z_{st} = 0.0625$). La partie positive correspond à la réaction d'oxydation du kérosène. Le pic de dégagement de chaleur négatif correspond à la réaction d'équilibre $CO - CO_2$ qui est une réaction endothermique. La distribution étant calculée sur le domaine de calcul entier, les points à dégagement de chaleur nul représentent les zones non réactives dans le domaine : les zones de fraction de mélange faible sont situées dans le plenum et le swirler, les autres sont situées en aval de la chambre. La Figure 6.25 (b) représente la distribution de dégagement de chaleur en fonction de la température gazeuse. Cette représentation permet de différencier facilement les différentes réactions. Ainsi, la réaction endothermique, celle d'équilibre entre le CO et le CO_2 , n'apparaît qu'à haute température.

Sachant que le temps de relaxation des particules et le temps d'évaporation des cas ELD_{32} et $ELRR$ sont plus grands que dans le cas ELD_{10} (au moins pour les plus grosses gouttes pour le cas $ELRR$) de légères différences sont attendues pour ces deux cas. La même analyse quantitative par distributions est donc effectuée pour les trois simulations, où la mise en évidence des régimes

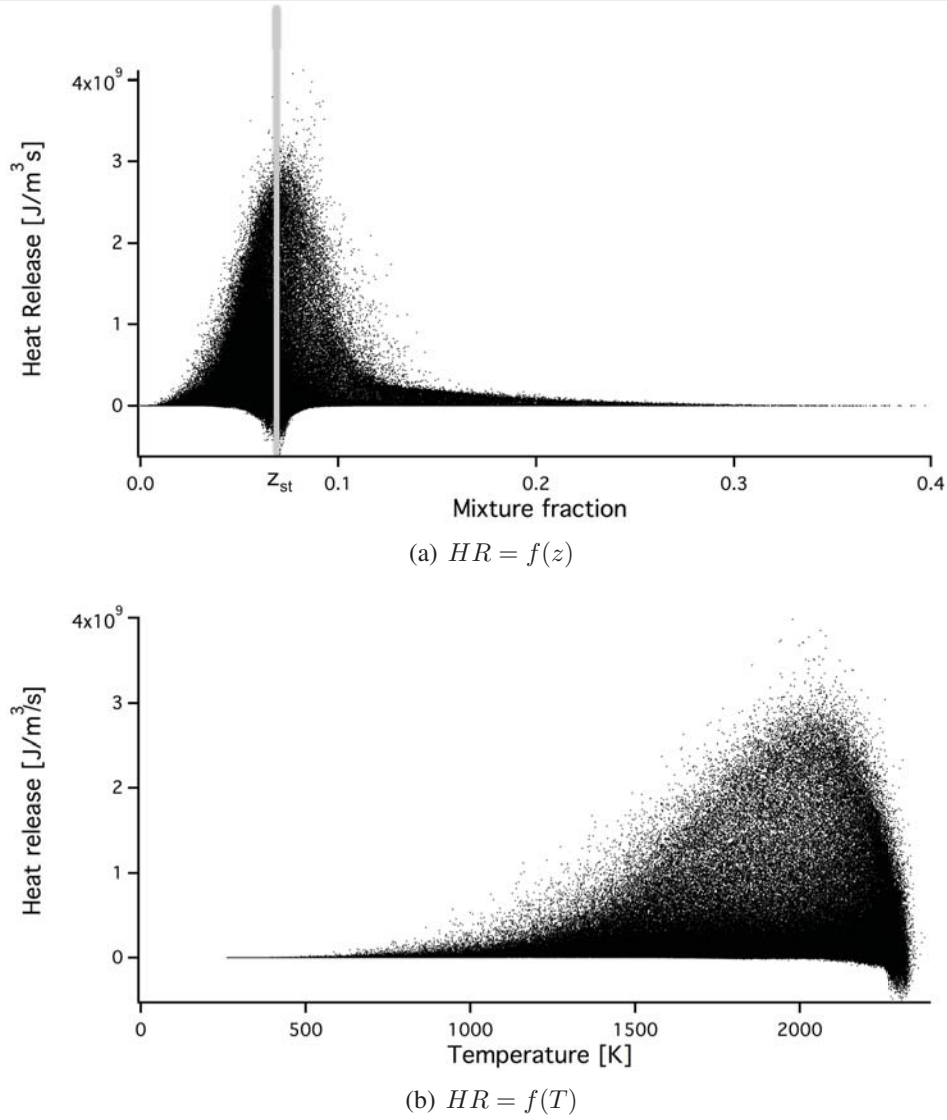
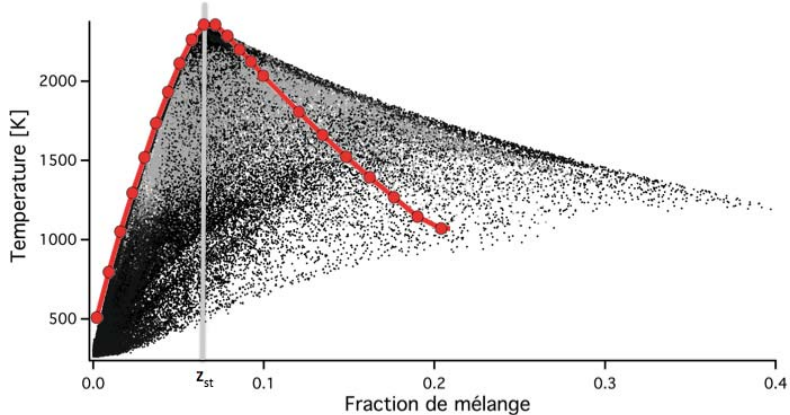


Figure 6.25: Distributions : (a) Dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange ; (b) Dégagement de chaleur en fonction de la température. Cas ELD_{10}

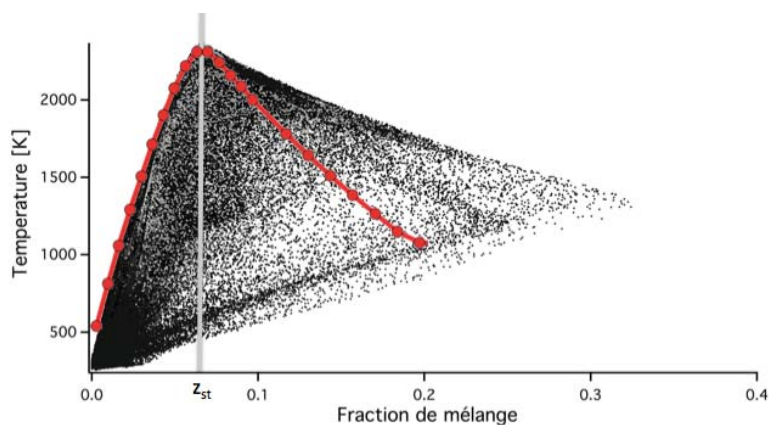
de combustion par l'indice de Takeno est étudiée. Les Figs 6.26 et 6.27 comparent les distributions de température gazeuse et de fraction massique de kérosène en fonction de la fraction de mélange dans les trois cas, colorées par l'indice de Takeno réactif. La courbe d'équilibre obtenue en considérant le kérosène injecté sous forme gazeuse est représentée en marqueurs rouges. Les trois simulations présentent les mêmes caractéristiques en termes de structure complexe de la flamme diphasique. Toutes les trois font apparaître une forme triangulaire limitée par trois courbes de pente

similaire. Des zones de combustion prémélangée riche et pauvre, représentées par des symboles gris, se superposent à des zones de combustion en diffusion, reportées avec des symboles noirs. On retrouve dans les trois cas une même limite inférieure, correspondant à des zones du domaine qui contiennent de l'air, du kérosène gazeux et des gaz brûlés. Ces mélanges peuvent alors brûler soit en mode prémélange, remplissant l'intérieur du triangle, soit en mode diffusion, formant la courbe supérieure, mais ils peuvent aussi représenter une zone de diffusion réactive. La courbe limitant le triangle à gauche correspond exactement à l'équilibre obtenu en phase gazeuse: en-dehors de la variation de richesse, la combustion prémélangée est peu perturbée par la phase liquide. En superposant les distributions des trois simulations, on observe que les courbes inférieure et supérieure ont la même pente (Fig. 6.28), indiquant que la source de kérosène gazeux (point limite à droite) a les mêmes caractéristiques en termes de température et concentration. Si on peut estimer la température de ce point limite à une valeur proche de la température d'ébullition du kérosène, il est plus difficile d'estimer sa concentration qui dépend de la fraction volumique liquide locale.

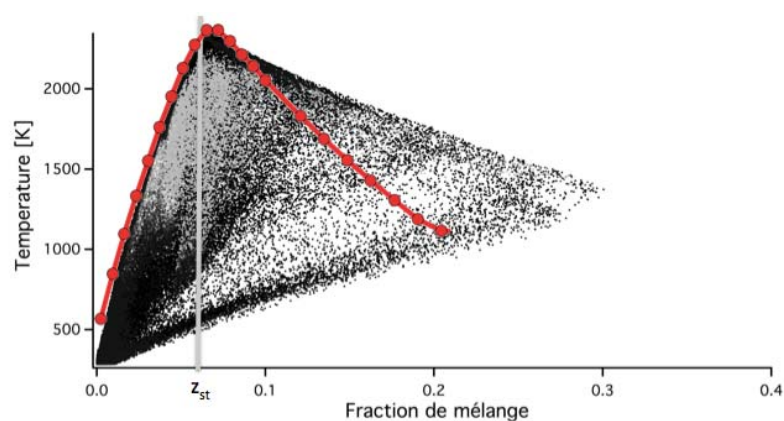
On observe aussi certaines différences : dans la simulation ELD_{10} , les flammes de prémélange existent sur une plus large gamme de richesse, avec $\phi \in [0.5; 3]$ (zones grises), alors que pour la simulation ELD_{32} , cette gamme pour la combustion prémélangée est plus restreinte. A l'inverse, la simulation $ELRR$ montre beaucoup de zones de combustion prémélangée autour de la stoechiométrie, ce qui est à mettre en relation avec les nombreuses petites gouttes qui évaporent vite et brûlent en proche injection. Une autre différence concerne les maxima de fraction de mélange atteints dans chacune des trois simulations. Ce maximum est lié à l'équilibre évaporation-combustion, et est donc d'autant plus grand que l'évaporation est rapide et la combustion est lente.



(a) ELD_{10}

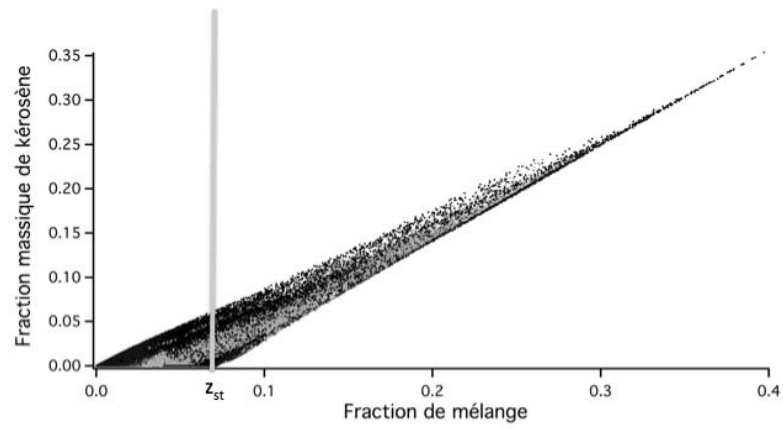


(b) ELD_{32}

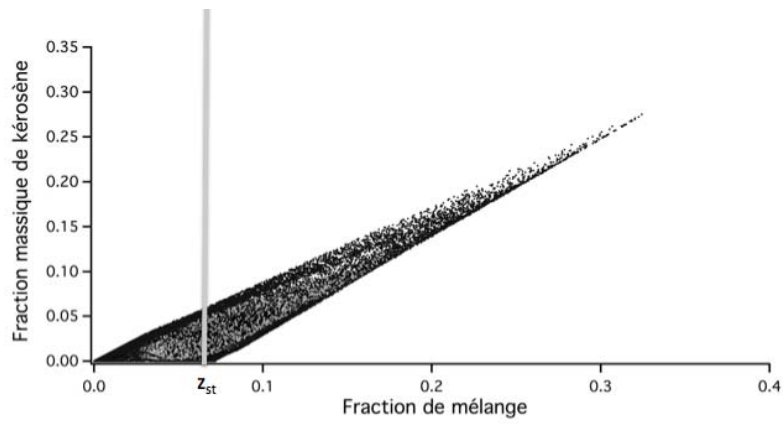


(c) $ELRR$

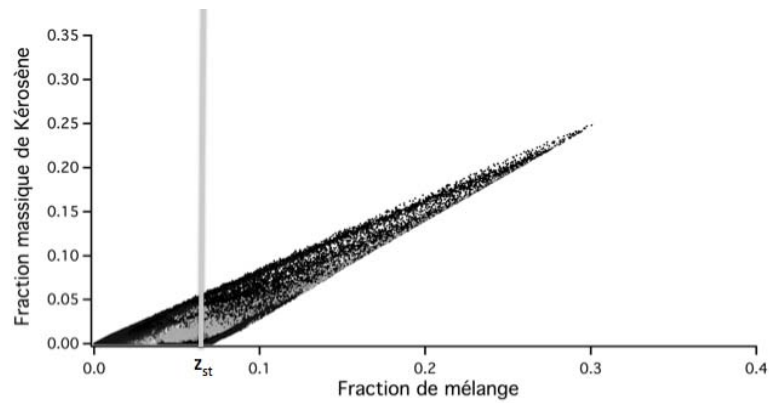
Figure 6.26: Distribution de température en fonction de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie, la courbe rouge avec marqueurs représente l'équilibre chimique.



(a) ELD_{10}



(b) ELD_{32}



(c) $ELRR$

Figure 6.27: Distribution de fraction massique de kérosène en fonction de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie.

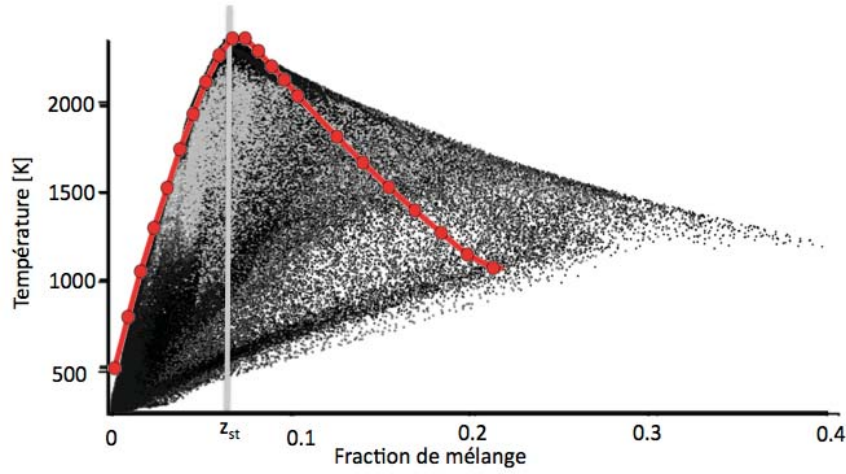


Figure 6.28: Superposition des distributions de température en fonction de la fraction de mélange pour les trois simulations. La droite grise indique la fraction de mélange à la stoechiométrie, la courbe rouge avec marqueurs représente l'équilibre chimique.

Bien que la structure de flamme soit globalement la même dans les trois cas, les différentes distributions de taille de gouttes jouent un rôle sur la fluctuation de fraction de mélange. La variance de la fraction de mélange à l'endroit où se trouvent les gouttes est reportée en Fig. 6.29, où une isoligne de fraction volumique liquide égale à 10^{-3} (noir) et à 10^{-5} (gris) sont superposées. On remarque que la variance est élevée dans deux zones particulières : là où le spray est dense, c'est-à-dire en proche injection, et dans les zones qui coïncident avec la flamme. Pour les simulations ELD_{10} et ELD_{32} , la zone proche injection de forte variance est due à la fluctuation de l'évaporation des gouttes monodisperses alors que pour le cas $ELRR$, cette variance est plus étalée à cause des petites gouttes qui s'évaporent vite. Cette variation de fraction de mélange reste faible loin de l'injecteur pour la simulation $ELRR$. Le même constat est réalisé en représentant les distributions de fraction volumique liquide en fonction de la variance de la fraction de mélange (Fig. 6.30). La simulation $ELRR$ présente un seul pic de variance en proche injection, alors que la simulation ELD_{10} fait apparaître nettement deux pics. La simulation ELD_{32} est intermédiaire avec deux pics qui tendent à se confondre. Le diamètre moyen D_{32} semble encore une fois mieux représenter la distribution polydisperse.

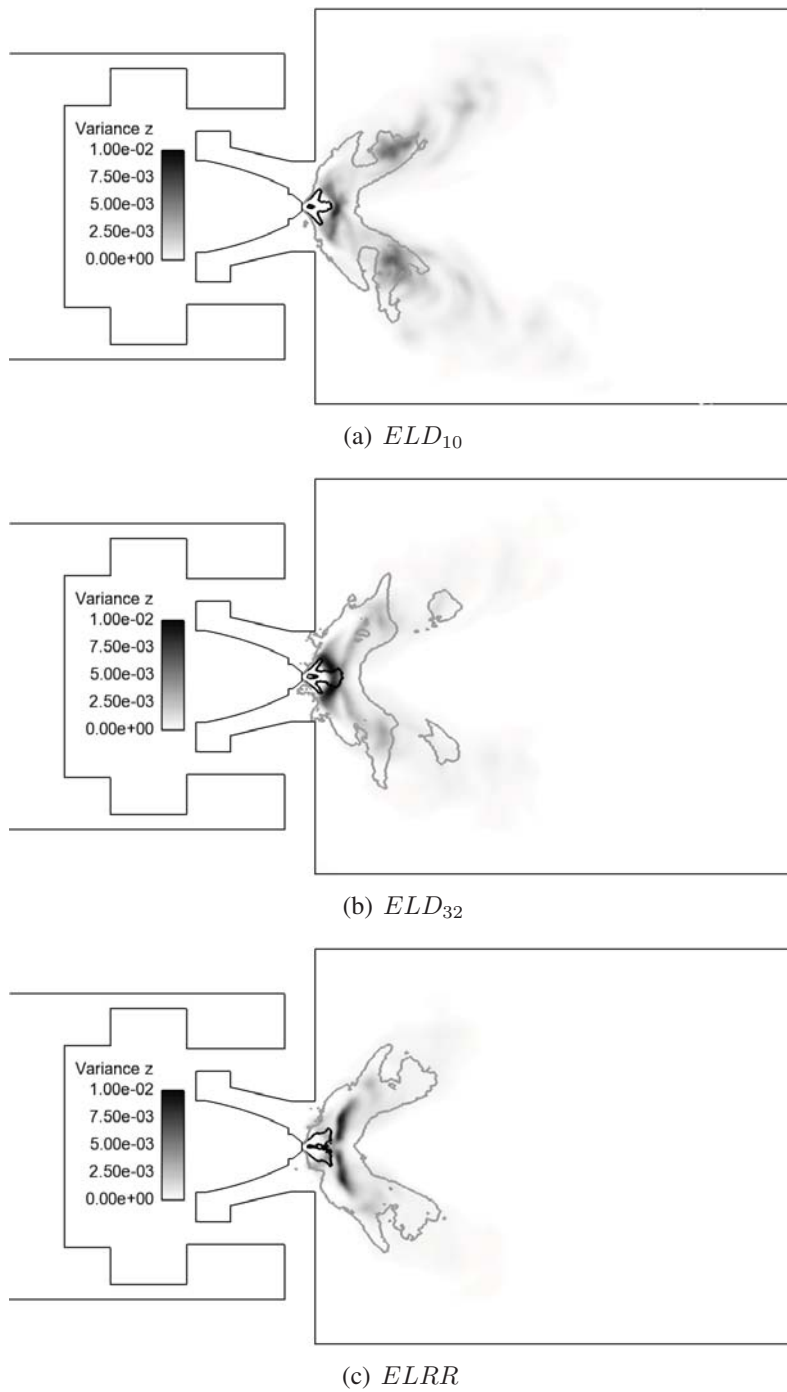
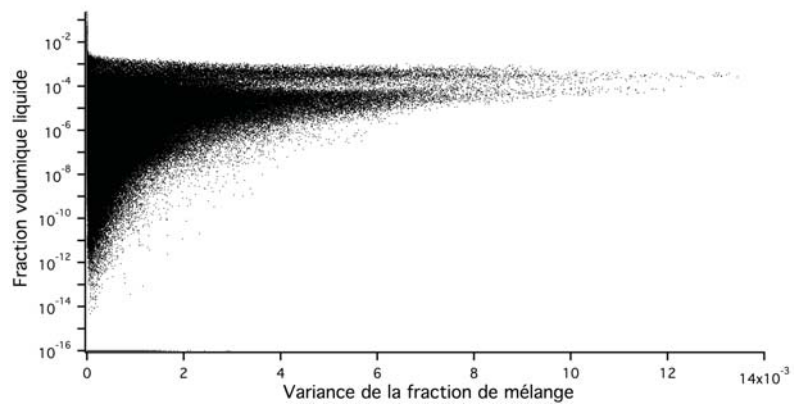
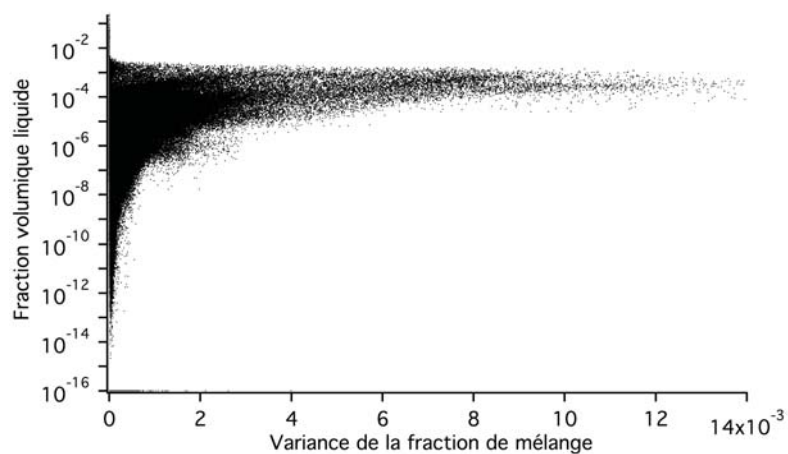


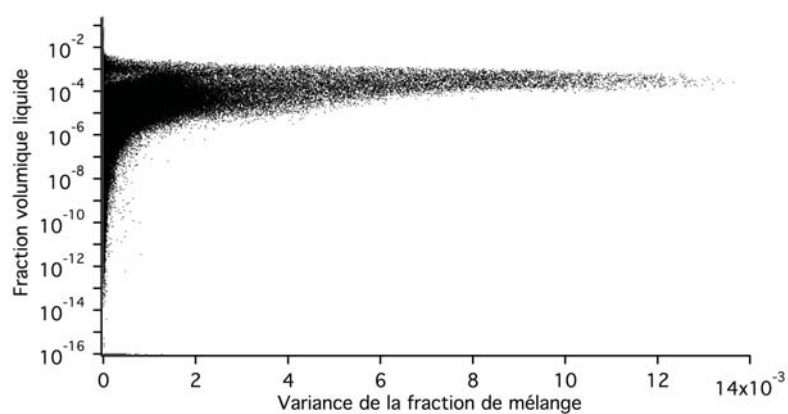
Figure 6.29: Champ de variance de la fraction de mélange. Ligne noire : isoligne de fraction volumique liquide à 10^{-4} , ligne grise : isoligne de fraction volumique liquide à 10^{-5} : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$



(a) ELD_{10}



(b) ELD_{32}



(c) $ELRR$

Figure 6.30: Distribution de fraction volumique liquide en fonction de la variance de la fraction de mélange : (a) ELD_{10} ; (b) ELD_{32} ; (c) $ELRR$

5 Premiers résultats avec l'approche Euler-Euler

Les trois calculs Lagrangiens ont montré un impact modéré de la distribution à l'injection sur la structure de la flamme. L'objectif suivant est d'évaluer l'impact du formalisme utilisé pour la phase dispersée sur la flamme, toujours dans la configuration MERCATO. A notre connaissance, cette comparaison entre formalismes Eulérien et Lagrangien dans une flamme diphasique n'a jamais été publiée à ce jour. Dans la section 3, on a montré que les résultats du cas ELD_{32} sont dans cette configuration très proches du cas polydisperse $ELRR$. On propose donc dans cette partie d'analyser les premiers résultats d'un calcul Eulerien avec une injection monodisperse de diamètre D_{32} , référencé EED_{32} . La section 5.1 décrit brièvement la méthode numérique utilisée, en termes de maillage, conditions aux limites, initialisation du calcul réactif Eulérien, schéma numérique et modèles physiques. Dans la section 5.2, la phase transitoire, de l'allumage à la flamme stabilisée, est analysée. Finalement, la section 5.3 présente les premiers résultats en termes de topologie d'écoulement diphasique réactif et de structure de flamme.

5.1 Méthode numérique

Dans cette partie, le maillage, les conditions aux limites, la méthodologie d'initialisation, le schéma numérique ainsi que les modèles physiques utilisés pour le cas EED_{32} sont résumés.

5.1. 1) Maillage

En Figs. 6.31 et 6.32 sont représentées des coupes dans le plan médian du maillage, noté $mercEE$, global d'une part, et d'un zoom en région proche injecteur d'autre part. La densité de ce maillage (Tab. 6.9) est analogue à celle du maillage $mercEL$ utilisé pour les calculs Lagrangiens (Tab. 6.5). La seule différence concerne la géométrie proche injecteur qui, comme expliqué dans le Chapitre 4, a été artificiellement élargie pour les calculs Eulériens afin d'appliquer précisément les profils issus du modèle FIM-UR. On remarque par ailleurs que dans ce cas, la surface d'injection est agrandie sans être déplacée vers l'aval, de manière à impacter le moins possible l'écoulement gazeux en proche injecteur.

Nombre de noeuds	2 099 780
Nombres de cellules	11 701 058
Taille de maille caractéristique à l'injection	0.07 mm
Taille de maille caractéristique en zone primaire	0.25 mm

Table 6.9: Caractéristiques du maillage $mercEE$

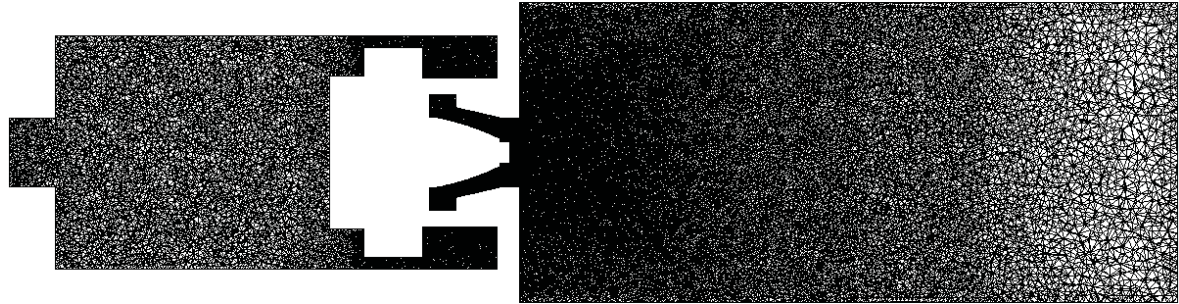


Figure 6.31: Coupe du maillage *mercEE* dans le plan médian

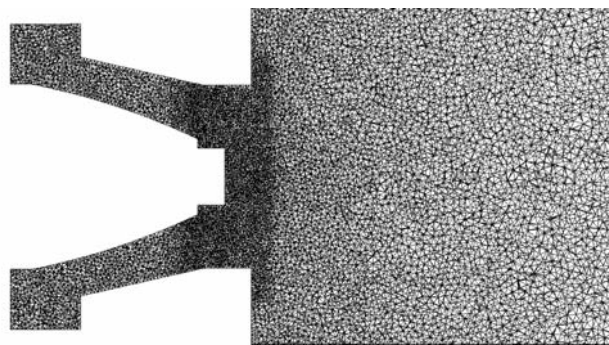


Figure 6.32: Coupe du maillage *mercEE* dans le plan médian. Détail de la région proche injecteur

5.1. 2) Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour la phase gazeuse sont identiques à celles utilisées dans les calculs Lagrangiens pour l'entrée du plenum, la sortie et les murs (Table 6.7). On note cependant une différence de traitement au niveau de l'injecteur, la surface d'injection étant dans le cas EED_{32} débitante pour le gaz du fait du modèle d'entraînement d'air dans le modèle FIM-UR Eulérien (section 1.3). Cette différence est cependant négligeable compte tenu des faibles débits d'air imposés en entrée d'injecteur (Fig. 6.33).

La Table 6.10 décrit les conditions aux limites pour la phase dispersée. Des lois de paroi glissante sont utilisées pour les murs (aucun modèle de rebond n'étant aujourd'hui implanté dans le code AVBP pour l'approche Eulérienne), la sortie de la chambre est convective, et le modèle FIM-UR modifié (Chapitre 4) est appliqué sur la condition aux limites d'injection. Les données d'entrée du modèle d'injection sont résumées dans la Table 6.11. En plus du point de fonctionnement, les données géométriques de l'injecteur et les caractéristiques du spray (demi-angle et diamètre D_{32} dans ce calcul) sont spécifiées. La Figure 6.33 présente les profils de vitesses gazeuse et liquide, et de fraction volumique liquide calculés par le modèle. Les vitesses d'entraînement d'air sont très faibles comparées aux vitesses liquides, et la fraction volumique liquide est de forme double gaussienne pour reproduire un cône creux. Si une comparaison directe entre les deux formalismes des profils liquides à l'injection n'est pas pertinente compte tenu des différences d'approche, les comparaisons dans un cas laminaire du Chapitre 4 d'une part et dans le banc MERCATO (cas évaporant non réactif) (Sanjosé et al., 2011) d'autre part, ont permis de montrer qu'en aval de l'injecteur, les profils de vitesse étaient similaires pour les deux formalismes.

Nom	Type
Injecteur	FIM-UR modifié
Sortie	convective
Murs	glissants

Table 6.10: Conditions aux limites pour la phase liquide

Surface d'injection A_p	Rayon de l'orifice de décharge R_o	Coefficient de décharge C_D	Diamètre des gouttes d	Demi-angle de spray θ_s
$1.789 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$	0.25 mm	0.32	$44 \mu\text{m}$	40°

Table 6.11: Données d'entrée pour le modèle FIM-UR Eulérien modifié

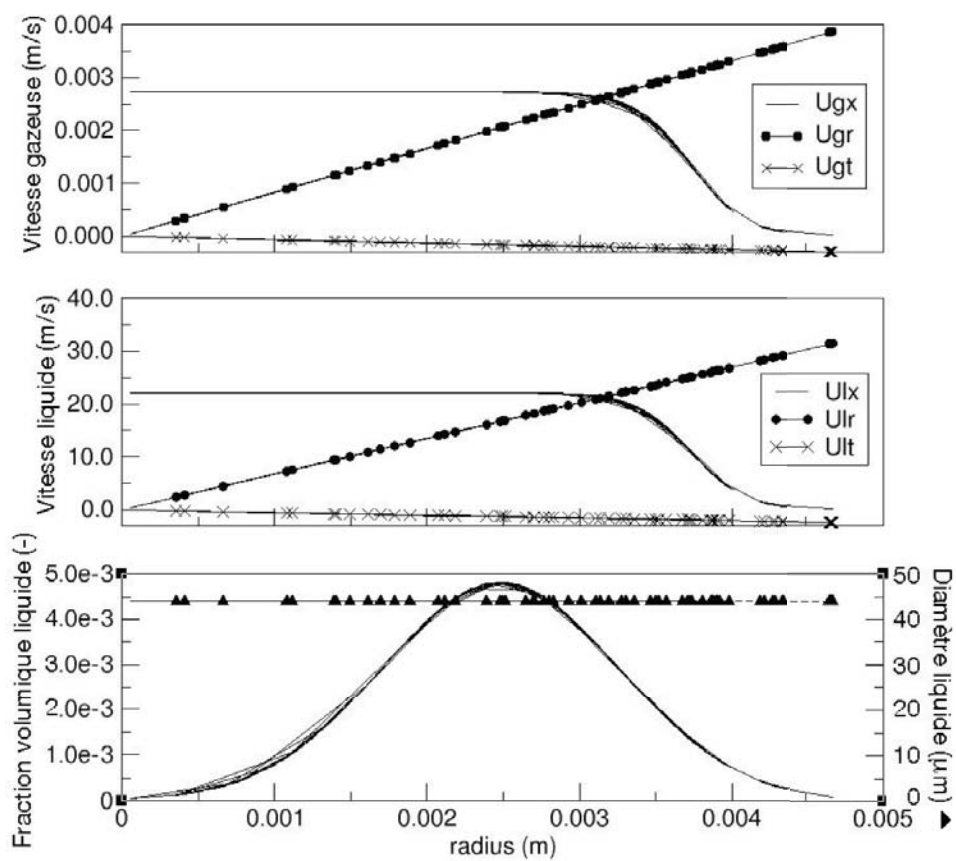


Figure 6.33: Profils de vitesses gazeuse et liquide, et de fraction volumique liquide et taille de goutte issus du modèle FIM-UR Eulérien modifié

5.1. 3) Initialisation du calcul réactif

De la même façon que dans les calculs Lagrangiens, l'initialisation s'est faite en deux étapes. Tout d'abord, un calcul de carburation (injection du carburant liquide dans un champ gazeux d'air pur stationnaire ; l'évaporation est activée, mais faible dans ces conditions de température $T_l = T_g = 293\text{ K}$; la combustion n'est pas activée). Pour installer une flamme, on impose un gradient de température en entrée de la chambre ($x = 0$), avec des gaz frais en amont dans le plenum et le swirler, et des gaz brûlés issus de la combustion d'un mélange kérosène-air à richesse $\phi_g = 0.95$ en aval dans la chambre. Si cette méthode n'est pas adaptée à l'étude d'une séquence d'allumage en tant que telle, elle permet d'établir rapidement une flamme stabilisée dans ce type de configuration. Une différence importante avec les calculs Lagrangiens réside dans les temps physiques calculés qui sont plus longs dans le calcul Eulérien : 5.5 ms de temps physique ont été calculés pour l'étape de carburation, puis 40 ms de temps physique pour l'établissement d'une flamme stabilisée, et enfin 25 ms d'accumulation des statistiques sur la flamme diphasique stabilisée. Si cette méthode est plus proche des expériences dans lesquelles la chambre est carburée pendant environ 1.5 s avant l'allumage, on montrera dans la section 5.2 qu'il conduit à un transitoire plus long.

5.1. 4) Schéma numérique et modèles physiques

Le schéma numérique TTGC (Colin and Rudgyard, 2000) a été utilisé pour la résolution des deux phases, avec une dissipation artificielle contrôlée basée sur un senseur de Colin pour la phase gazeuse, et un senseur CMT (Martinez et al., 2010) pour la phase liquide.

En termes de modèles de sous-maille, les modèles WALE (Ducros et al., 1998) et de Moreau et al. (2005) sont utilisés pour la fermeture du tenseur turbulent dans les équations des phases gazeuse et liquide respectivement. Le modèle TFLES (Charlette et al., 2002) permet de prendre en compte l'interaction turbulence-flamme à l'échelle de la sous-maille. Tout comme dans le calcul Lagrangien, le senseur de détection de la flamme est basé sur la réaction d'équilibre $CO - CO_2$ et évalué à la stoechiométrie.

Les termes d'échange entre les deux phases se réduisent à la traînée, avec rétro-action des particules sur le gaz, et à l'évaporation. On rappelle ici que la fermeture des termes sources filtrés diffèrent pour les deux formalismes. Le modèle TFLES induit une multiplication des termes sources chimiques par le facteur d'épaississement \mathcal{F} (ainsi qu'une division des termes diffusifs par \mathcal{F}). Dans les deux calculs, l'ordre de grandeur du facteur d'épaississement est $\mathcal{F} \simeq 15 - 20$ pour les deux formalismes. Dans l'approche Euler-Euler, les préconisations de Boileau (2007) sont appliquées, et le terme source d'évaporation est également divisé par \mathcal{F} tandis que le terme source de traînée ne l'est pas. Ce n'est pas le cas pour le formalisme Lagrangien dans lequel aucun des termes sources d'échange entre les deux phases n'est affecté par \mathcal{F} . C'est la principale différence entre les deux formalismes utilisés dans ce travail en termes de modèle.

5.2 Analyse de l'écoulement transitoire, de l'allumage à la flamme stabilisée

Dans cette partie, l'écoulement transitoire depuis la carburation et l'allumage grossier, jusqu'à l'établissement d'une flamme diphasique stabilisée est étudié. Cette stratégie d'initialisation d'une flamme diphasique dans une chambre aéronautique reproduit qualitativement une séquence d'allumage au banc expérimental. Cependant, les temps physiques mis en jeu en réalité (de l'ordre de la seconde) sont trop longs pour être facilement calculés en LES.

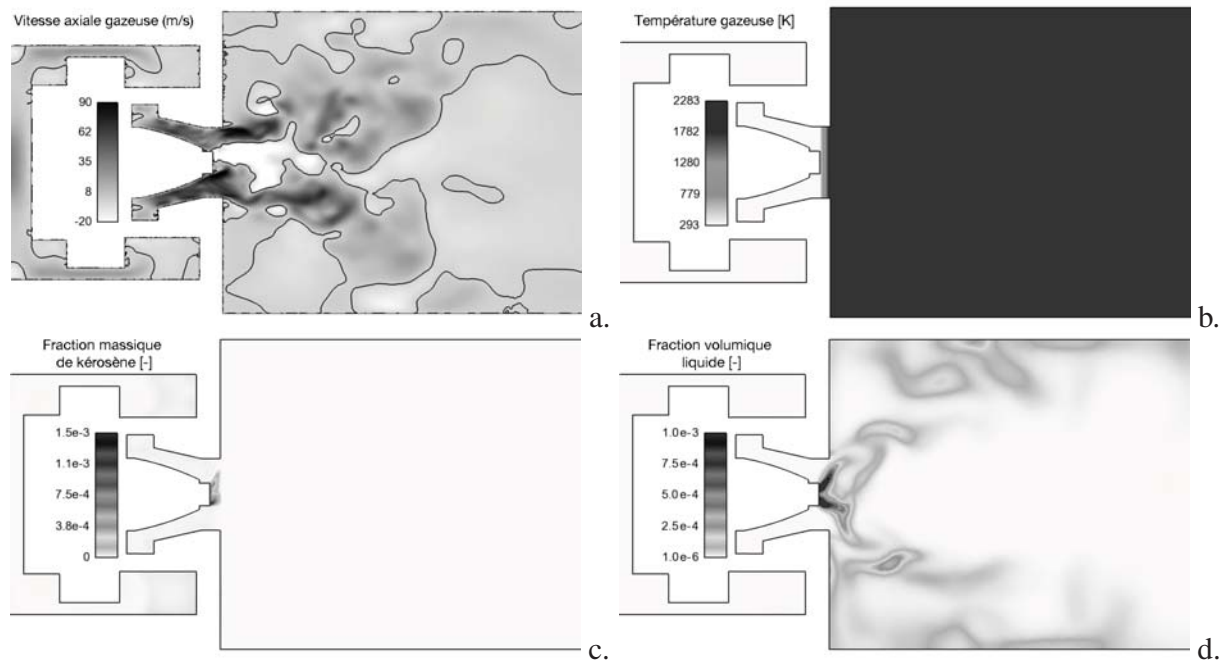


Figure 6.34: Champs instantanés de a.) vitesse axiale gazeuse (la ligne noire représente l'isoline $u_g = 0 \text{ m.s}^{-1}$), b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux et d.) fraction volumique liquide dans le plan médian, à l'instant de l'allumage grossier $t_{ign} = 5.5 \text{ ms}$

La Figure 6.34 présente des coupes dans le plan médian des champs instantanés de vitesse axiale gazeuse, température gazeuse, fraction massique de kérosène et fraction volumique liquide, à la fin de l'étape de carburation, à l'instant de l'allumage grossier ($t_{ign} = 5.5 \text{ ms}$, $t = 0$ correspondant au début de la carburation). L'écoulement gazeux présente une structure classique avec des IRZ, CRZ et SRZ. On note que l'IRZ remonte très proche de l'injecteur. La concentration en kérosène gazeux est très faible partout dans la chambre, dû à l'injection des gaz frais à la température ambiante qui ne favorise pas l'évaporation du carburant liquide. En revanche, le carburant liquide est déjà dispersé dans la première moitié de la chambre bien que les fractions volumiques liquides restent mesurées (20 fois plus faibles qu'à l'injection). Compte tenu du champ de température

gazeux imposé par la méthode d'allumage grossier, les gouttes vont être immédiatement soumises à des gaz chauds, favorisant leur évaporation rapide.

C'est ce qu'on observe en Fig. 6.35 qui présente des champs instantanés des mêmes grandeurs ainsi que du taux de dégagement de chaleur à $t_{trans} = 12.7 \text{ ms}$, soit 7 ms après l'allumage. Le champ de vitesse axiale gazeuse garde la même topologie avec d'une part une IRZ qui crée un point d'arrêt en très proche injecteur, et d'autre part des CRZ qui capturent le kérosène évaporé dans la zone primaire. Le carburant gazeux remplit les zones de coin et la zone centrale dans l'axe de l'injection tandis que le liquide forme un cône de demi-angle proche de $\theta_s = 40$. Les gouttes n'atteignent alors pas les parois du fait d'une température gazeuse trop élevée qui favorise l'évaporation en proche paroi. En ce qui concerne la flamme, elle est accrochée aux coins du swirler grâce aux SRZ mais n'est pas fermée au centre.

Ce n'est que 45 ms après l'allumage qu'une flamme diphasique stabilisée s'installe dans la chambre ($t_{stab} = 45 \text{ ms}$). Une vue instantanée de l'écoulement diphasique réactif alors obtenu est donnée en Fig. 6.36. Les zones de recirculation de coin ne comportent plus de carburant gazeux. Le kérosène gazeux est très corrélé au champ de fraction volumique liquide, principalement localisé en aval de l'injection, mais également dans le jet et au niveau des parois de la chambre. Dans cette zone, on trouve en effet du carburant liquide qui vient impacter puis glisser aux parois, un modèle de paroi glissante étant utilisé pour la phase liquide dans ce calcul. La flamme est toujours accrochée aux coins du swirler et est à présent fermée au centre par une flamme de diffusion entre le kérosène issu de l'injection liquide et l'air fourni par l'IRZ. On observe par ailleurs de la combustion en proche parois du fait des gouttes impactant la paroi et formant du kérosène.

L'étude de ce transitoire depuis l'allumage d'une chambre carburée à froid jusqu'à l'établissement d'une flamme diphasique stabilisée a permis de mettre en évidence les différents états de la chambre dans cette période. Si la méthodologie d'allumage dans ce cas est grossière et n'est pas destinée à représenter la physique de l'allumage pas bougie (des modèles plus sophistiqués sont alors disponibles (Lacaze et al. (2009); Colin and Truffin (2011))), elle met en évidence un long transitoire, propre aux écoulements diphasiques, du fait de l'évaporation des gouttes puis de la capture du kérosène gazeux dans les zones de recirculation de coin qui sont alors longues à vider. Il est donc important de cerner les objectifs d'un calcul diphasique réactif avant de choisir une méthodologie permettant d'accéder au régime stabilisé. Si ce type de séquence, bien que plus longue que pour des flammes non-prémélangées gazeuses, reste raisonnable en termes de coût calcul avec un formalisme Eulérien, il convient d'être encore plus prudent avec un formalisme Lagrangien dont la convergence statistique est bien plus longue à obtenir.

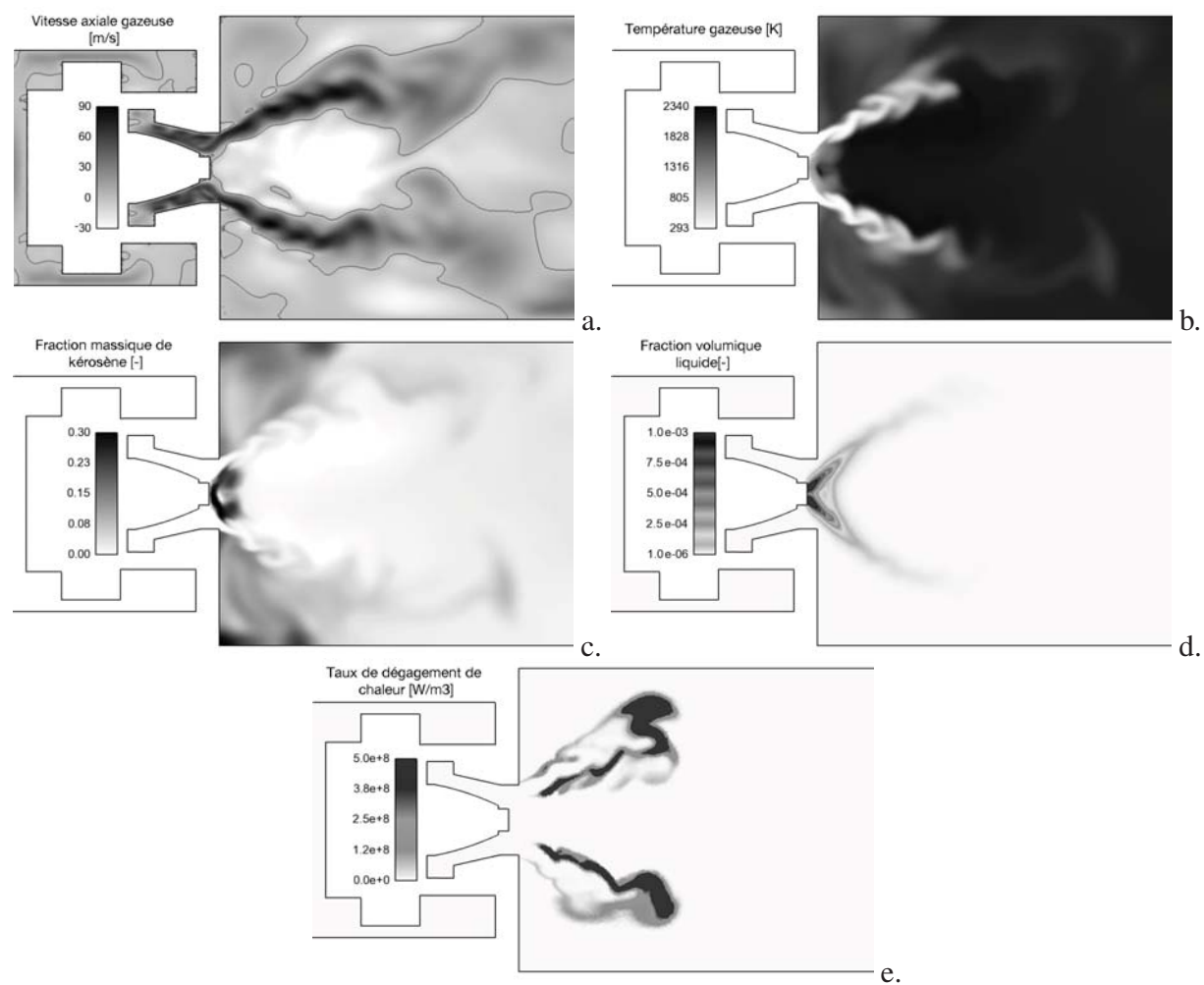


Figure 6.35: Champs instantanés de a.) vitesse axiale gazeuse (la ligne noire représente l'isoline $u_g = 0 \text{ m.s}^{-1}$), b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux, d.) fraction volumique liquide, et e.) taux de dégagement de chaleur dans le plan médian, à l'instant $t_{trans} = 12.7 \text{ ms}$

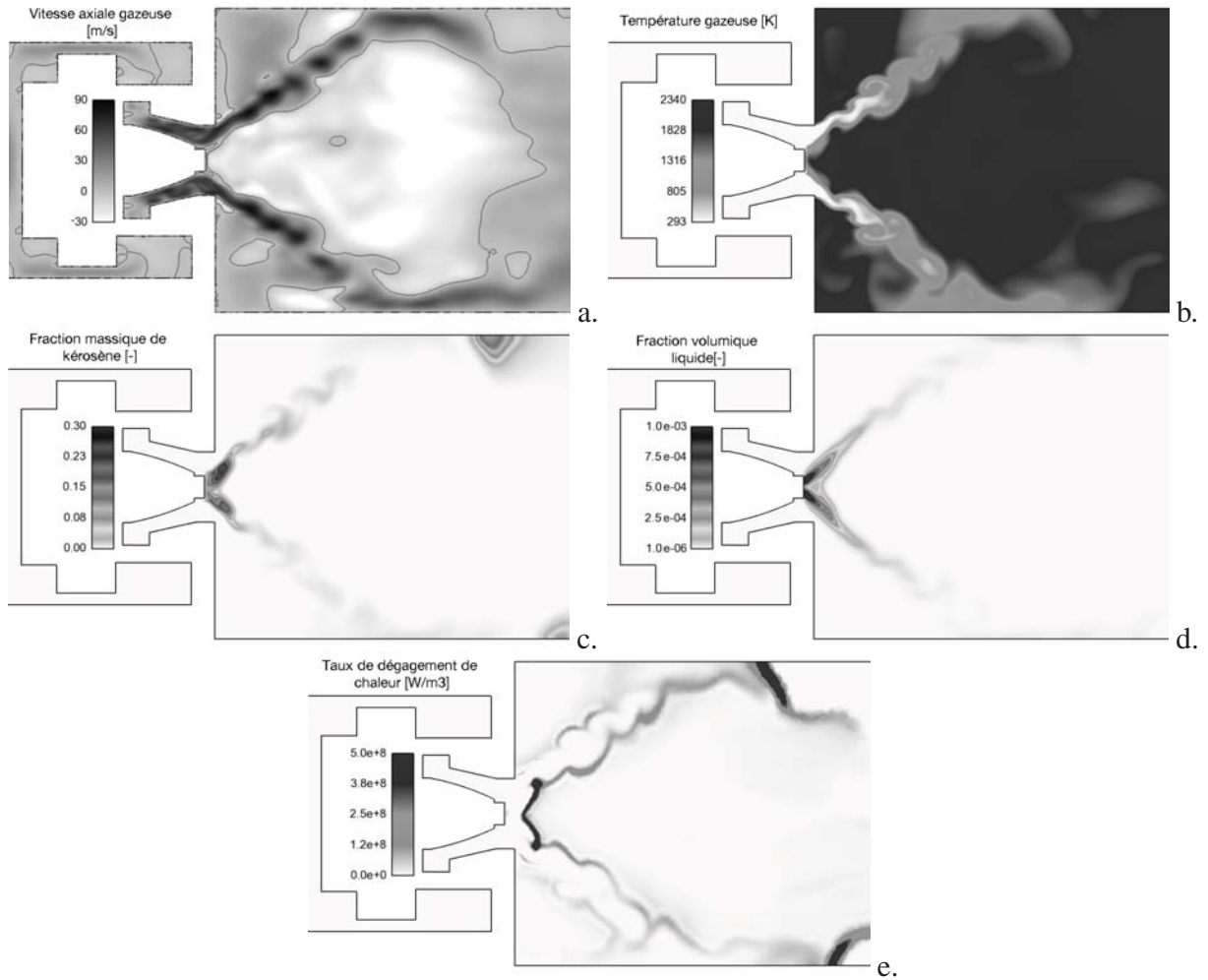


Figure 6.36: Champs instantanés stabilisés de a.) vitesse axiale gazeuse, b.) température gazeuse, c.) fraction massique de kérosène gazeux et d.) fraction volumique liquide dans le plan médian, $t_{stab} = 45 \text{ ms}$

5.3 Topologie de l'écoulement diphasique réactif et structure de flamme

L'objectif à présent est d'analyser les premiers résultats obtenus avec l'approche Euler-Euler pour la flamme diphasique stabilisée. Le cas EED_{32} peut être dans un premier temps qualitativement comparé au cas ELD_{32} .

Les Figures 6.37 et 6.38 caractérisent la flamme diphasique réactive obtenue avec le formalisme Eulérien, en termes de dynamique d'une part et de combustion d'autre part. La Figure 6.37 est à comparer aux Figs. 6.7–6.9 pour la vitesse gazeuse. Le calcul Eulérien présente de façon similaire trois types de zones de recirculation, IRZ, CRZ et SRZ. Cependant, l'IRZ présente plusieurs différences comparée à celle du calcul Lagrangien : elle remonte au niveau de l'injecteur alors qu'elle stagne légèrement en aval (proche de $x = 0$ m) dans le cas Lagrangien ; par ailleurs, elle s'ouvre subitement radialement dans la deuxième moitié de la chambre ; enfin, la vitesse y est en valeur absolue plus faible, surtout dans la première moitié de l'IRZ. Le jet d'air est ainsi plus ouvert mais moins large que dans les calculs Lagrangiens, ce que confirme le champ de vitesse gazeuse tangentielle. La forme du champ de vitesse axiale liquide est semblable à celle du gaz, bien que les vitesses dans le jet soient moins grandes. Compte tenu de la comparaison proposée dans la section 3 entre les calculs Lagrangiens et les mesures en termes de profils de vitesses axiales gazeuse et liquide, la dynamique dans la chambre semble mieux reproduite dans le calcul Lagrangien que dans le calcul Eulérien. Ce résultat est difficile à expliquer d'un point de vue dynamique uniquement, dans la mesure où les deux formalismes ont montré de bons accords dans plusieurs écoulements diphasiques à froid de complexité croissante (Dombard, 2011; Sierra, 2012; Riber et al., 2009), y compris dans la chambre MERCATO (Sanjosé et al. (2011)). Tous ces travaux utilisent des paramètres numériques comparables avec le cas EED_{32} , écartant la question de la précision de la solution numérique.

En Fig. 6.38, le champ de fraction volumique liquide montre une trajectoire des gouttes cohérentes avec le champ de vitesse liquide : les gouttes d'une part s'agglomèrent en sortie d'injecteur, coincées par la CRZ qui remonte proche de l'injection, et d'autre part sont transportées par le jet d'air et finissent par impacter les parois. Comparé aux calculs Lagrangiens monodisperses, les gouttes sont dans le cas Eulérien plus confinées en proche injecteur et forment un cône moins large dans la chambre. Par ailleurs, seul le cas polydisperse $ELRR$ met en évidence des interactions gouttes-parois, les plus grosses gouttes de la distribution Rosin-Ramler (plus grosses que le D_{32} utilisé dans ce cas Eulérien) étant à l'origine de ce phénomène. Les champs de température liquide et de fraction massique de kérosène mettent en évidence deux zones principales d'évaporation : en sortie d'injecteur, une forte concentration de kérosène gazeux est observée, plus intense et plus proche de l'injecteur que dans les cas Lagrangiens. Par ailleurs, la température liquide d'équilibre est atteinte bien plus proche de l'injecteur dans le cas Eulérien. Une deuxième zone chargée en carburant gazeux se situe au niveau des parois, ce qui est cohérent avec le champ de fraction volumique obtenu. En termes de combustion, il en résulte une flamme de même forme en M que dans le cas Lagrangien, traversée par le cône liquide, mais bien plus intense proche de l'injecteur

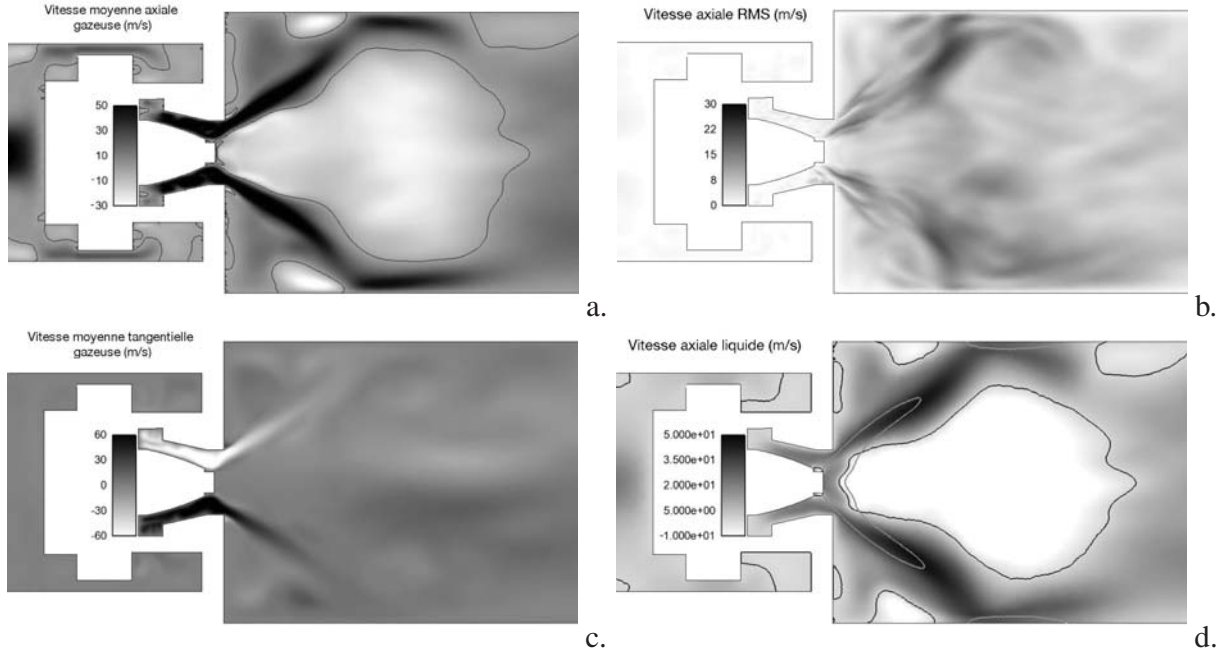


Figure 6.37: Champs moyens de a.) vitesse axiale gazeuse, b.) vitesse axiale gazeuse fluctuante, c.) vitesse tangentielle gazeuse, et d.) vitesse axiale liquide dans le plan médian

et même attachée aux bords de la surface d'injection, et également plus intense proche des parois de la chambre que sur les bords du M .

Les Figures 6.39 et 6.40 présentent la structure de flamme du cas EED_{32} à l'aide de champs instantanés d'indice de Takeno réactif (éq. 6.5) et de gaz frais, et de distributions de température gazeuse et de fraction massique de kérosène en fonction de la fraction de mélange respectivement. On retrouve des similitudes entre les deux formalismes, avec deux zones de diffusion, l'une proche de l'injecteur, l'autre proche des parois, et une zone de prémélange entre ces deux zones de diffusion. Néanmoins, dans le cas Eulerien, la zone de diffusion proche injecteur est très intense, attachée aux bords de la surface d'injection. On n'observe par ailleurs que très peu de zones mêlant les deux régimes plus en aval, contrairement au cas Lagrangien.

Les vérifications menées jusqu'à présent n'ont pas permis de mettre en évidence l'origine de ces différences. La principale différence étant la flamme de diffusion proche de l'injecteur, une première piste est une différence au niveau du mélange calculé dans cette zone. Une comparaison précise des conséquences du modèle FIM-UR dans cette zone pourrait permettre de proposer des premiers éléments de réponse. Les champs de température liquide étant également différents dans cette zone, l'impact du traitement du terme source d'évaporation filtré (division ou non par \mathcal{F}) doit

être évalué. Une deuxième piste concerne la méthodologie d'allumage et le calcul du transitoire résultant. Un allumage plus précoce dans le cas Eulérien pourrait permettre de reproduire un transitoire plus proche du calcul Lagrangien, évaluant la possibilité d'une bifurcation dans un tel calcul de flamme stabilisée.

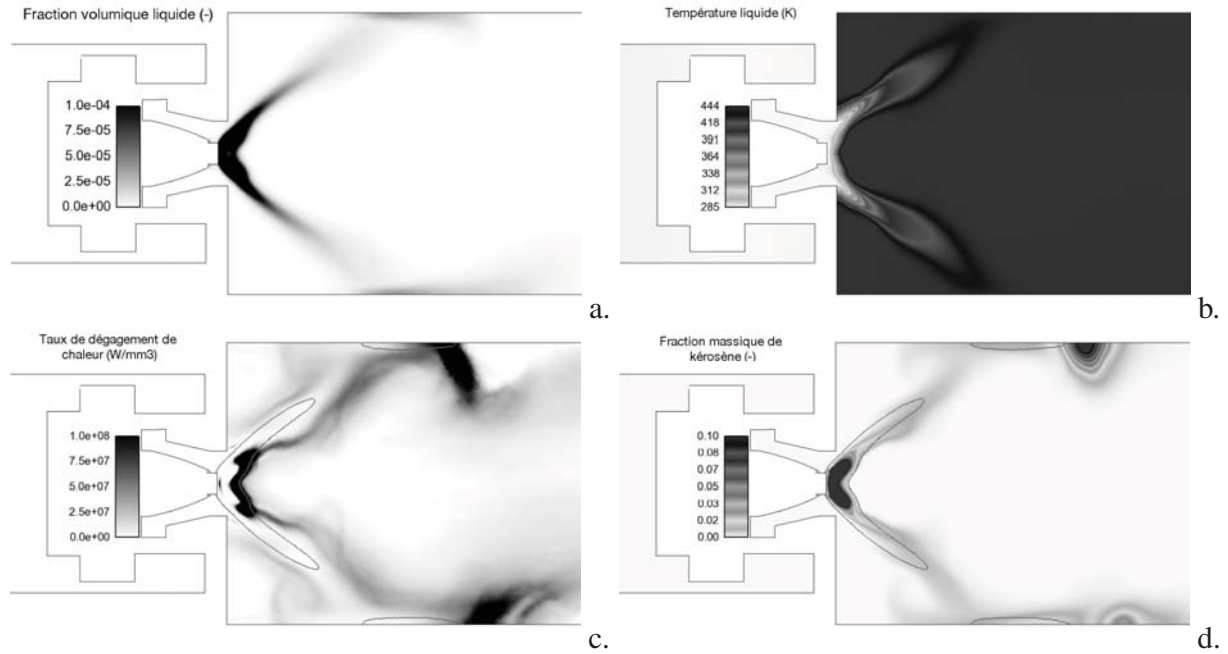


Figure 6.38: Champs moyens de a.) fraction volumique liquide, b.) température liquide, c.) taux de dégagement de chaleur, d.) fraction massique de kérosène dans le plan médian

6 Conclusion

Dans ce chapitre, trois simulations Lagrangiennes réactives ont tout d'abord permis d'étudier les structures de flamme diphasique. Les résultats du Chapitre 5 ont permis de choisir trois distributions en entrée d'injecteur : deux monodisperses de diamètres D_{10} puis D_{32} et une polydisperse Rosin-Ramler. Les comparaisons avec l'expérience en termes de dynamique montrent des accords corrects en termes de champs de vitesses gazeuse et liquide, seules mesures disponibles. La longueur du spray varie pour les différentes simulations : pour les simulations monodisperses, elle augmente avec le diamètre injecté. La simulation polydisperse donne une longueur plus grande que les simulations monodisperses. Cette différence en termes de longueur ne semble pas affecter la répartition moyenne de fraction massique de carburant gazeux dans la chambre. Globalement, la dynamique et la flamme données par le calcul monodisperse de diamètre D_{32} sont plus proches

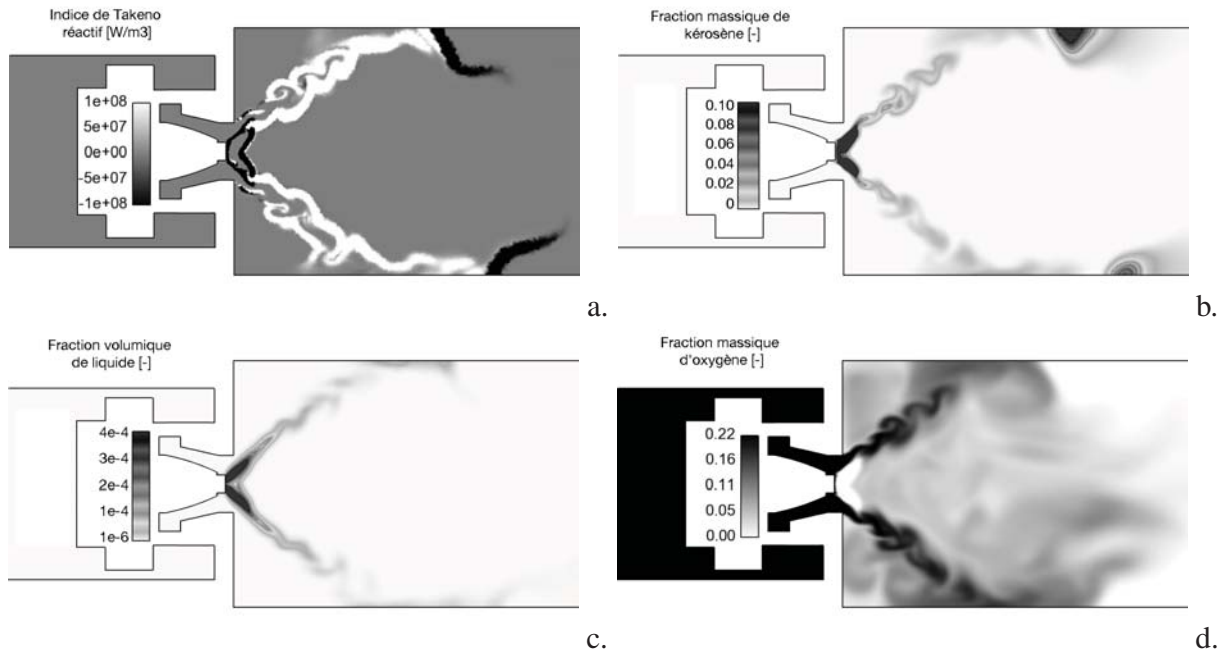


Figure 6.39: Champs instantanés de a.) indice de Takeno réactif (flamme de diffusion: noir, flamme de prémélange : blanc - la ligne noire représente l'isoline $HR = 8.10^7 \text{ W.m}^{-3}$), b.) fraction massique de kérosène, c.) fraction volumique liquide, et d.) fraction massique d'oxygène dans le plan médian

du calcul polydisperse que le calcul monodisperse de diamètre D_{10} .

La structure de flamme a été étudiée par analyse des champs d'indice de Takeno réactif et caractérisation des différentes zones de flamme en traçant des distributions de grandeurs réactives en fonction de la fraction de mélange. Une structure de flamme diphasique complexe, composée à la fois de flammes de diffusion et de prémélange, a été mise en évidence. En effet, on observe des gouttes qui s'évaporent avant le front de flamme et brûlent soit en diffusion avec de l'air et des gaz brûlés provenant de l'IRZ, soit en prémélange avec de l'air provenant du swirler. On observe également des gouttes qui traversent le front de flamme et se retrouvent piégées dans les gaz chauds où leur évaporation se poursuit et forment alors des poches de diffusion. La distribution de gouttes à l'injection ne semble pas être de première importance pour la structure de flamme au vu des comparaisons réalisées entre les trois calculs. Les simulations présentent des structures de flamme comparables, et là encore la simulation monodisperse de diamètre D_{32} est proche du calcul polydisperse.

Dans une deuxième phase, un travail de comparaison des formalismes Lagrangien et Eulérien dans le cas d'une injection liquide monodisperse, de diamètre D_{32} a été initié. Tout d'abord, l'obtention d'une flamme diphasique stabilisée après carburation et allumage avec une méthode grossière, non

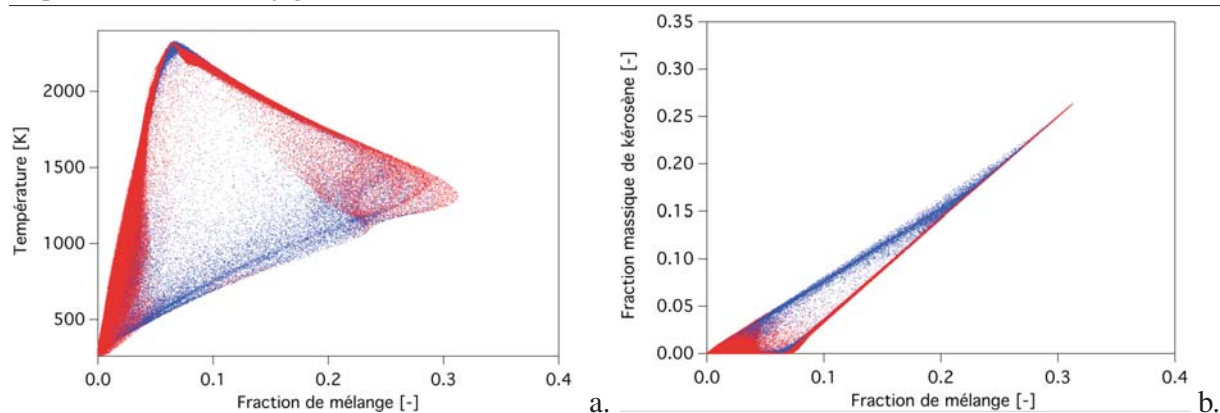


Figure 6.40: Distribution instantanée colorisée par l'indice de Takeno réactif (flamme de diffusion : rouge, flamme de prémélange : bleu) de a.) température gazeuse et b.) fraction massique de kérosène gazeux en fonction de la fraction de mélange

représentative d'une séquence d'allumage, a permis de mettre en évidence un scénario des différentes étapes dans le transitoire d'un tel calcul. L'intérêt du formalisme Eulérien mésoscopique qui renseigne intrinsèquement les moyennes statistiques de la phase dispersée dans ce type de calcul a été mis en évidence. Le formalisme Lagrangien, lui, montre des temps de convergence statistique importants comparés aux temps physiques, surtout dans les zones de recirculation, et est encore aujourd'hui hors de notre portée d'un point de vue coût calcul. Puis, une analyse de la flamme diphasique stabilisée a montré que si la structure de la flamme était proche dans les deux formalismes, des différences apparaissent principalement au niveau de la zone réactive en proche injecteur, région dans laquelle le mélange semble différent. Il s'en suit une moins bonne prédiction de l'aérodynamique avec le formalisme Eulérien. Plusieurs pistes d'étude sont proposées pour comprendre ces différences : impact du modèle d'injection, de la fermeture du terme source d'évaporation en LES, et méthodologie d'allumage sont les trois premières envisagées.

Conclusion

Le contexte de pollution actuel a imposé la recherche de nouveaux concepts en combustion, toujours plus innovants et efficaces. Pouvoir caractériser l'évolution du carburant liquide dans un moteur est donc essentiel pour améliorer la combustion. Dans cette optique, l'utilisation de la Simulation aux Grandes Echelles est utilisée afin de comprendre l'impact de la phase liquide sur la structure de la flamme.

Dans un premier temps, on a présenté les équations et modèles pour la phase gazeuse, et la phase liquide, en dissociant les deux formalismes mis en jeu dans cette étude : le formalisme Eulérien, et le formalisme Lagrangien.

Puis l'accent a porté sur l'étude du modèle d'injection FIM-UR pour un cas laminaire simplifié, et l'impact de la polydispersion a été quantifié. La comparaison avec les expériences a montré la capacité du modèle à reproduire une structure en forme de cône creux. Une étude de convergence en maillage a montré l'importance du nombre de points pour décrire les différents profils d'injection dans le formalisme Eulérien. Finalement, la structure de cône creux pour une distribution polydisperse a bien été retrouvée et a montré la structure étagée des gouttes à l'intérieur du cône creux : les gouttes les plus fines restent au centre du cône alors que les plus grosses se retrouvent à distances radiales les plus importantes par rapport à l'axe d'injection.

Le deuxième chapitre s'est intéressé à évaluer l'impact de la polydispersion d'un spray et à le comparer à des simulations monodisperses. Afin de comprendre la physique, on étudie l'interaction spray-turbulence dans des cas de Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules en comparant l'évolution de la ségrégation et de la traînée moyenne. La ségrégation d'un spray polydisperse est a priori très différente de celle d'un spray monodisperse de diamètre moyen communément rencontré dans la pratique. La simple moyenne de la ségrégation des différentes classes qui composent la distribution polydisperse donnent de bons accords pour la partie transitoire, ce qui laisse supposer qu'aucune classe de gouttes n'a un comportement prépondérant par rapport aux autres. En prenant une combinaison linéaire des ségrégations de ces classes pondérées par le nombre de Stokes inverse associé à chacune de ces classes, on retrouve la ségrégation polydisperse. De plus, comme les classes de grosse gouttes ont un nombre de Stokes très grand, leur poids est faible, et quatre classes suffisent à reconstruire la ségrégation polydisperse. Pour la traînée moyenne, les diamètres D_{10} et D_{20} semblent être plus proches du comportement de la distribution polydisperse. Concernant l'évaporation, le choix d'un paramètre de comparaison pertinent a été difficile. La définition d'autres diamètres issus de la littérature des lits fluidisés a permis de choisir une autre

diamètre, le $D^{50\%}$, qui coïncide, avec la distribution choisie au diamètre D_{32} .

Le chapitre suivant a présenté les résultats issus des simulations Lagrangiennes monodisperses, polydisperse, et leur comparaison aux mesures dans la chambre MERCATO. Globalement de bons accords sont trouvés avec l'expérience. Le diamètre moyen D_{32} semblent le mieux représenter la distribution polydisperse en termes de dynamique, au vu des profils de vitesses axiales gazeuses, fluctuantes et liquides. La comparaison des champs moyens montre une quasi similarité entre les différentes simulations Lagrangiennes. Néanmoins, l'étude de la phase liquide montrent que le spray est plutôt court pour ELD_{10} , plus large pour ELD_{32} et enfin bien plus diffus pour $ELRR$ en raison de la large gamme de temps particulaire et d'évaporation. De plus, l'étude des bilans en masse au cours du temps indique que les trois simulations ont bien la même masse de carburant dans la chambre, mais une répartition entre masse liquide et masse gazeuse de carburant différente. Le cas ELD_{10} présente beaucoup de carburant gazeux et peu de carburant liquide alors que la simulation $ELRR$ en présente beaucoup, et la simulation ELD_{32} présente un comportement intermédiaire. L'étude de l'indice de Takeno réactif différencie les zones en régimes de combustion. On observe que dans les trois simulations, les gouttes traversent le front de flamme où elles s'évaporent et forme une première flamme de prémélange, puis finissent par s'évaporer dans les gaz chauds en formant des poches qui brûlent en diffusion, un comportement encore plus marqué dans la simulation polydisperse qui contient des gouttes suffisamment grosses pour survivre longtemps. En comparant les distributions en fraction de mélange, il apparaît que les trois simulations ont une structure très proche, avec de la combustion en prémélange et en diffusion, et des courbes limites caractéristiques identiques, même si la présence de nombreuses petites gouttes dans la simulation polydisperse génère un prémélange bien plus marqué que dans les simulations monodisperses. Enfin la comparaison de la fraction volumique de liquide par la variance de la fraction de mélange montre que la fraction de mélange fluctue beaucoup en sortie d'injecteur et dans la flamme. Là encore, l'utilisation du D_{32} pour représenter une distribution de Rosin-Rammler est conseillée, et des études sur d'autres distributions devraient être effectuées. Des premiers calculs Eulériens ont été effectués et ont montré des différences en termes de mélange et flamme. Ces différences seront étudiées dans de prochains travaux pour en déterminer précisément l'origine. La correction du taux d'évaporation par l'épaississement dans les calculs Eulériens, absente des calculs Lagrangiens, est une première piste, et sera investiguée dans la thèse de [Paulhiac \(2014\)](#). Bien que l'impact de la distribution de taille de gouttes ne donne pas de différences majeures dans cet écoulement réactif, les calculs de carburation à froid sont fortement dépendants de la distribution à l'injection. En effet, la taille de gouttes conditionne la répartition de carburant dans la chambre avant l'allumage. Des travaux dans la configuration multipoint TECC ont montré que les grosses gouttes sont capables d'atteindre la zone à proximité de la bougie, en raison de leur inertie plus grande. Dans ce cas, l'impact de la distribution semble important.

Références bibliographiques

- A. Albrecht, B. Bédard, T. Poinso, and O. Simonin. Direct numerical simulation and modelling of evaporating droplets in homogeneous turbulence: application to turbulent flames. In *15th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray System - ILASS Europe*, Toulouse, France, 1999. 38
- J. Amaya. *Unsteady coupled convection, conduction and radiation simulations on parallel architectures for combustion applications - TH/CFD/10/40*. PhD thesis, Université de Toulouse, France - MeGeP Dynamique des Fluides, 2010. 50
- A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888. 69
- P.A. Beau, T. Ménard, R. Lebas, A. Berlement, S. Tanguy, and F.-X. Demoulin. Numerical jet atomization. Part II: modeling information and comparison with DNS. In *Proceedings of the Fluid Engineering Division Summer Meeting*. ASME, 2006. 66
- C. Beck, R. Koch, and H.J. Bauer. Identification of droplet burning modes in lean, partially pre-vaporized swirl-stabilized spray flames. *Proc. Combust. Inst.*, 32:in press, 2009a. 40
- C. H. Beck, R. Koch, and H.J. Bauer. Numerical investigation of the time scales of single droplet burning. *Flow, Turbulence and Combustion*, 82:571–598, 2009b. 40
- R. Belt and O. Simonin. Quadrature method of moments for the pdf modeling of droplet coalescence in turbulent two-phase flow. *Proceedings of the ASME FEDSM 2009*, 2009. 68
- R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids A*, 5(22): 436–444, 1993. 61
- R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. 78
- M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. 4, 43, 65, 87, 88, 215
- M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinso, and C. Béarat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, 154(1-2):2–22, 2008. 87

- M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* , 375:235–263, 1998. 74
- R. Borghi. On the structure and morphology of turbulent premixed flames. In C. Bruno and C. Caseci, editors, *Rec. Adv. in Aerospace Sci.*, pages 117–138. 1985. 39
- R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996. 41
- H. Boughanem and A. Trouvé. Validation du code de simulation directe NTMIX3D pour le calcul des écoulements turbulents réactifs. Technical Report 42907, Institut Français du Pétrole, 1996. 146
- J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Ecole Polytechnique, Paris, 1903. 69
- B.S. Brewster, S.M. Cannon, J.R. Farmer, and F. Meng. Modelling of lean premixed combustion in stationary gas turbines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25(353):85, 1999. 37
- Anne Bruyat. *Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique*. PhD thesis, INPT, 2012. 176
- S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, 20 (10):998–1005, 1928. 39, 201
- T. D. Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Proc. Combust. Inst.* , 16(1):1503 – 1515, 1977. 61
- D.R. Carlisle. Communication on The performance of a type of swirl atomizer, by A. Radcliffe. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 169:101, 1955. 93
- G. Castanet, T. Liénard, and F. Lemoine. Dynamics and temperature of droplets impacting onto a heated wall. *International journal of heat and mass transfer*, (52):670–679, 2009. 33
- F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion: Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* , 131: 159–180, 2002. 61, 183, 215
- Patrick Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides, Analyse du phénomène dans une perspective de modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Institut National Polytechnique de Toulouse, 2000. 143, 144
- C. Chauveau, F Halter, A. Lalonde, and I. Gokalp. An experimental study on the droplet vaporization : effects of heat conduction through the support fiber. In *ILASS*, number 4-1, Como Lake, Italy, 2008. 78, 79

- H. H. Chiu, H. Y. Kim, and E. J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. In *19th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 971–980. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1982. 15, 41
- O. Colin. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000. 183
- O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2):338–371, 2000. 63, 113, 147, 215
- O. Colin and K. Truffin. A spark ignition model for large eddy simulation based on an fsd transport equation (issim-les). *Proc. Combust. Inst.*, 33:3097–3104, 2011. 217
- O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7):1843–1863, 2000. 61, 64
- G.E. Cossali. An integral model for gas entrainment into full cone sprays. *J. Fluid Mech.*, 439: 353–366, 2001. 99, 100, 101, 102, 105
- J. Cousin, A. Berlemont, T. Ménard, and S. Grout. Primary breakup simulation of a liquid jet discharged by a low-pressure compound nozzle. *Computers and Fluids*, 2012. 66
- C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 1998. 71
- S. de Chaisemartin, L. Fréret, D. Kah, F. Laurent, R. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing. *CRAS*, 337: 438–448, 2009. 68
- O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *J. Comput. Phys.*, 227:8395–8416, 2008. 66, 90
- D.G. Goodwin. *Cantera C++ Users Guide*. <http://sourceforge.net/projects/cantera>, 2002. 78
- J. Dombard. *Direct Numerical Simulation of non-isothermal dilute sprays using the Mesoscopic Eulerian Formalism*. PhD thesis, INPT, 2011. 16, 68, 220
- P. Domingo, L. Vervisch, and J. Réveillon. Dns analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combust. Flame*, 140(3):172–195, 2005. 41
- O. A. Druzhinin and S. Elghobashi. Direct numerical simulations of bubble-laden turbulent flows using the two-fluid formulation. *Phys. Fluids*, 10(3):685–697, 1998. 79
- H. L. Dryden and A. M. Kuethe. Effect of turbulence in wind tunnel measurements. Technical Report 342, Natl. Advisory Comm. Aeronaut., 1930. 143

- F. Ducros, F. Nicoud, and T. Poinso. Wall-adapating local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. In *ICFD*, pages 293–300. Baines M. J., 1998. [55](#), [183](#), [215](#)
- S. Elghobashi and G. C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. i: Turbulence modification. *Phys. Fluids* , 5(7):1790–1801, 1993. [74](#)
- A. Eyssartier, B. Cuenot, L.Y.M. Gicquel, and T. Poinso. Using LES to predict ignition sequences and ignition probability of turbulent two-phase flames. *Combustion and Flame*, submitted in june 2011, 2012. [176](#)
- P. Fede, H. Neau, O. Simonin, and I. Ghouila. 3d unsteady numerical simulation of the hydrodynamic of a gas phase polymerization pilot reactor. In *7th International Conference on Multiphase Flow 2010*, 2010. [163](#)
- R. P. Fedkiw, T. Aslam, and S. Xu. The ghost fluid method for deflagration and detonation discontinuities. *J. Comput. Phys.* , 154(2):393–427, 1999. [90](#)
- J. Ferry and E. Balachandar. Equilibrium expansion for the eulerian velocity of small particles. *Powder Technology*, 125:131–139, 2002. [67](#)
- P. Février. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000. [140](#)
- P. Février, O. Simonin, and D. Legendre. Particle dispersion and preferential concentration dependence on turbulent reynolds number from direct numerical simulation and large eddy simulation of isotropic homogeneous turbulence. In *Proc. 4th International Conference on Multiphase Flow*, New Orleans, USA, 2001. ICFM-2000. [149](#)
- P. Février, O. Simonin, and K. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.* , 533:1–46, 2005. [62](#), [67](#), [68](#), [79](#)
- F. Fichot, F. Lacas, D. Veynante, and S. Candel. One-dimensional propagation of a premixed turbulent flame with the coherent flame model. *Combust. Sci. Tech.* , 48:1–26, 1993. [60](#)
- R.O. Fox, F. Laurent, and M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework: Direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *J. Comput. Phys.* , 227:058–3088, March 2008. [68](#)
- B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combust. Flame* , 157(7):1364–1373, 2010. [16](#), [58](#), [59](#), [60](#), [62](#), [183](#)

-
- N. Frössling. Über die verdunstung fallenden tropfen, (evaporation of falling drops). *Gerlands Beitäge zur Geophysik*, 52:170–216, 1938. [75](#)
- D. Fuster, A. Bagué, T. Boeckc, L. Le Moynea, A. Leboissetier, S. Popinet, P. Raya, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *International Journal of multiphase flow*, 35:550–565, 2009. [32](#), [66](#), [90](#)
- M. García, E. Riber, O. Simonin, and T. Poinot. Comparison between Euler/Euler and Euler/Lagrange les approaches for confined bluff-body gas-solid flow. In *Proc. 6th International Conference on Multiphase Flow*, 2007. [43](#)
- N. García-Rosa. *Phénomènes d’allumage d’un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale : Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés, Toulouse, France, July 2008. [175](#)
- A. Garmory and E. Mastorakos. Capturing localised extinction in sandia flame f with les-cmc. *Proc. Combust. Inst.* , 33(1):1673 – 1680, 2011. [61](#)
- R. Gatignol. The faxén formulae for a rigid particle in an unsteady non-uniform stokes flow. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, 1(2):143–160, 1983. [71](#)
- M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* , 3(7):1760–1765, 1991. [54](#)
- F. Gevrin, O. Masbernat, and O. Simonin. Granular pressure and particle velocity fluctuations prediction in liquid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 63(9):2450–2464, May 2008. [163](#)
- P. Givi. Model-free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 15:1–107, 1989. [37](#)
- I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press Inc., 2nd edition edition, June 1980. [101](#), [105](#)
- F.F. Grinstein and C. Fureby. Les studies of the flow in a swirl gas combustor. *Proc. of the Combustion Institute*, 30(1791):8, 2005. [35](#)
- D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J. Comput. Phys.*, 152(2): 423–456, 1999. [90](#)
- O. L. Gulder and G. J. Smallwood. Inner cutoff scale of flame surface wrinkling in turbulent premixed flames. *Combust. Flame* , 103:107–114, 1995. [61](#)
-

- G. Hannebique. Simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique avec injecteurs multipoints. Rapport de Projet de Fin d'études WN/CFD/09/121, Université de Bordeaux 1 - Ecole MatMeca, Novembre 2009. [245](#)
- M. Herrmann. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(2674-2706), 2008. [66](#)
- J. O. Hinze. Turbulent fluid and particle interaction. *Prog. Heat Mass Transfer*, 6:433–452, 1972. [74](#)
- J. O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, mcgraw-hill classic textbook reissue edition, 1987. [144](#)
- K. Hishida, K. Takemoto, and M. Maeda. Turbulent characteristics of gas-solids two-phase confined jet. *Japanese Journal of Multiphase Flow*, 1(1):56–69, 1987. [85](#)
- Y. Huang and V. Yang. Dynamics and stability of lean-premixed swirl- stabilized combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35:293–364, 2009. [15](#), [40](#)
- G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation: effects of transient and variable properties. *International journal of heat and mass transfer*, 18:1003–1008, 1975. [78](#)
- Y. Itoh, N. Taniguchi, T. Kobayashi, and T. Tominaga. Large eddy simulation of spray combustion in swirling flows. In *ASME FEDSM*, Honolulu, Hawaii, USA, 2003. [43](#)
- R. Jackson. Locally averaged equations for motion for a mixture of identical spherical particles and a newtonian fluid. *Chemical Engineering Science*, 52(15):2457–2469, 1997. [79](#)
- F. Jaegle. *LES of two-phase flow in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, December 2009. [43](#), [74](#), [245](#)
- F. Jaegle, O. Cabrit, S. Mendez, and T. Poinso. Implementation methods of wall functions in cell-vertex numerical solvers. *Flow Turb. and Combustion*, 85(2):245–272, September 2010. doi: 10.1007/s10494-010-9276-1. [16](#), [64](#), [69](#)
- A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981. [63](#)
- W. P Jones, S. Lyra, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of a swirl stabilized spray flame. *Proc. of the Combustion Institute*, 33:2153–2160, 2011a. [43](#)
- W. P. Jones, S. Lyra, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of swirling kerosene spray flames. *Combustion and Flame*, 33:1539–1561, 2011b. [43](#)

- W. P. Jones, C. Lettieri, Aj. Marquis, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of the two-phase flow in an experimental swirl stabilized burner. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38:145–158, 2012. [43](#), [175](#)
- W.P. Jones, S. Lyra, and A. J. Marquis. Large eddy simulation of evaporating kerosene and acetone sprays. *International journal of heat and mass transfer*, 53:2491–2505, 2010. [43](#)
- N.D. Joshi, M.J. Epstein, S. Durlak, S. Marakovitz, and P.E. Sabla. Development of a fuel air premixer for aeroderivative dry low emissions combustors. *ASME Paper 94-GT-0253*, 1994. [15](#), [36](#)
- A. N. Karpetis and A. Gomez. An experimental study of well-defined turbulent nonpremixed spray flames. *Combust. Flame* , 121(1):1–23, 2000. [38](#)
- A. Kaufmann. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004. [43](#), [62](#), [68](#), [79](#), [85](#)
- A. Kaufmann and M. Moreau. A spectral projection method for analysis of autocorrelation functions and projection errors in discrete particle simulation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* , 58(7): 709–725, 2008. [67](#), [85](#)
- A. Kaufmann, M. Moreau, O. Simonin, and J. Hélie. Comparison between lagrangian and mesoscopic eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *J. Comput. Phys.* , 227(13):6448–6472, 2008a. [140](#), [149](#), [151](#)
- A. Kaufmann, M. Moreau, O. Simonin, and J. Hélie. Comparison between lagrangian and mesoscopic eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *J. Comput. Phys.*, 227:6448–6472, 2008b. [85](#)
- A. R. Kerstein, W. Ashurst, and F. A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev. A*, 37(7):2728–2731, 1988. [60](#)
- A. Y. Klimenko and R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 25(6):595 – 687, 1999. [61](#)
- J. D. Kulick, J. R. Fessler, and J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in fully developed channel flow. *J. Fluid Mech.* , 6:3742–3749, 1994. [74](#)
- K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2005 Second Edition. [40](#), [41](#)
- G. Lacaze, E. Richardson, and T. J. Poinso. Large eddy simulation of spark ignition in a turbulent methane jet. *Combust. Flame* , 156(6):1993–2009, 2009. [217](#)

- N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. [43](#), [63](#), [175](#)
- F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse sprayflames: origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001. [67](#)
- F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 194(2):505–543, 2004. [67](#)
- J. Lavedrine. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans des modèles d'injecteur de moteurs aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2008. [245](#)
- J. Laviéville, E. Deutsch, and O. Simonin. Large eddy simulation of interaction between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field. In *6th Int. Symp. On Gas-Solid Flows*, volume 228, pages 347–357. ASME FED, 1995. [149](#)
- R. Lebas, T. Menard, P. Beau, and A. Berlemenot ans F. X. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization:dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, (35):247–260, 2009. [32](#)
- T. Lederlin and H.Pitsch. Large eddy simulation of an evaporating and reacting spray. *CTR Annual Research Briefs*, pages 479–490, 2008. [175](#)
- D.S Lee, G. Pitari, V. Grewe, and K. Gierens. Transport impacts on atmosphere and climate: Aviation. *Atmospheric Environment*, 44:4678–4734, 2010. [28](#)
- A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Taylor & Francis, 1989a. [93](#)
- A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Combustion (Hemisphere Publishing Corporation). Taylor & Francis, 1989b. [25](#), [142](#)
- A. H. Lefebvre. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999. [15](#), [29](#)
- A. H. Lefebvre. *Gas Turbines Combustion*,. Taylor & Francis, third edition edition, 2010. [15](#), [35](#)
- J.-Ph. Légier. *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001. [59](#)
- J.-Ph. Légier, T. Poinso, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000. [62](#)

- P. A. Libby and F. A. Williams. Turbulent combustion: fundamental aspects and a review. In *Turbulent Reacting Flows*, pages 2–61. Academic Press London, 1994. 61
- T. Lieuwen and K. McManus. Combustion dynamics in lean-premixed prevaporized gas turbine. *Journal of Propulsion and Power*, (19):721, 2003. 35
- T. Lieuwen and V. Yang. Combustion instabilities in gas turbine engines. operational experience, fundamental mechanisms and modeling. In *AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics*, volume 210, 2005. 35
- T. Lieuwen, H. Torres, C. Johnson, and B. Zinn. A mechanism of combustion instability in lean premixed gas turbine combustors. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 123(1): 182–189, 2001. 34
- G. Linassier, R. Lecourt, and G. Lavergne. Detailed analysis of a swirled air/kerosene spray in reactive and non reactive conditions downstream from an actual turbojet injection sytem. *Proceeding of ASME Turbo Expo 2011, Power of Land, Sea and Air.*, (ASME2011-45173), 2011. 20, 21, 175, 176, 177, 178, 199
- T. F. Lu and C. K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proc. Combust. Inst.*, 30(1):1333–1341, 2005. 57
- J. Luche, M. Reuillon, J-C. Boettner, and M. Cathonnet. Reduction of large detailed kinetic mechanisms: application to kerosene / air combustion. *Combust. Sci. Tech.* , 176:1935–1963, 2004. 59, 60
- K. Luo, H. Pitsch, M. G. Pai, and O. Desjardins. Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor. *Proc. of the Combustion Institute*, (33):2143–2152, 2011. 37, 43, 175
- T. Marchione and S. F. Ahmed ad E. Mastorakos. Ignition of turbulent swirling n- heptane spray flames using single and multiple sparks. *Combustion and Flame*, 156:166–180, 2009. 43
- D. Marchisio, J. Pikturna, R. Fox, and V. R. D. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(1266-1276), 2003. 68
- D. L. Marchisio and R. O. Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *J. Aerosol Sci.*, 36:43–73, 2005. 68
- L. Martinez. *Simulation aux Grandes Échelles de l'Injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, Institut Français du Pétrole, Paris, September 2009. 90
- L. Martinez, A. Benkenida, and B. Cuenot. A model for the injection boundary conditions in the context of 3d simulation of diesel spray: Methodology and validation. *Fuel*, 89(1):219–228, January 2010. 44, 215

- F. Mashayek, F. A. Jaber, R. S. Miller, and P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *International Journal of multiphase flow*, 23(2):337–355, 1997. [39](#)
- E. Masi. *Theoretical and numerical study of the modeling of unsteady non-isothermal particle-laden turbulent flows by an Eulerian-Eulerian approach*. PhD thesis, INP Toulouse, 2010. [85](#), [86](#)
- E. Masi, B. Bédard, M. Moreau, and O. Simonin. Euler-euler large-eddy simulation approach for non isothermal particle-laden turbulent jet. In *8th Int. Sym. on Numerical Methods for Multiphase Flow*, number 55143 in ASME-FEDSM, Jacksonville, Florida, USA, August 2008. [67](#)
- E. Masi, E. Riber, P. Sierra, O. Simonin, and L. Gicquel. Modeling the random uncorrelated velocity stress tensors for unsteady particle eulerian simulation in turbulent flows. In *International Conference on Multiphase flow 2010*, 2010. [67](#)
- M. Massot, R. Knikker, C. Péra, and J. Réveillon. Lagrangian/eulerian analysis of the dispersion of evaporating droplets in a non-homogeneous turbulent flow. In *International Conference on Multiphase Flow 2004*, 2004. [68](#), [69](#)
- E. Mastorakos, T. A. Baritaud, and T. J. Poinot. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. *Combust. Flame*, 109:198 – 223, 1997. [61](#)
- M. Maxey and J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Phys. Fluids*, 26(4), 1983. [69](#), [70](#)
- M. R. Maxey. Distortion of turbulence in flows with parallel streamlines. *J. Fluid Mech.*, 124: 261–282, 1982. [140](#)
- M. R. Maxey. The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields. *J. Fluid Mech.*, 174:441–465, 1987. [140](#)
- M. R. Maxey and B. K. Patel. Localized force representations for particles sedimenting in Stokes flow. *International Journal of multiphase flow*, 27(9):1603–1626, 2001. [73](#)
- T. Menard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods: Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of multiphase flow*, 33:510–524, 2007. [16](#), [66](#), [67](#), [90](#)
- Y. Mizutani, K. Nakabe, and J. D. Chung. Effects of turbulent mixing on spray ignition. In *23rd Symp. (Int.) in Combustion*, page 1455. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990. [38](#)
- P. Moin. Advances in large eddy simulation methodology for complex flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23(5):710–720, October 2002. doi: 10.1016/S0142-727X(02)00167-4. [38](#)

- M. Moreau. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. Phd thesis, INP Toulouse, 2006. 154, 156
- M. Moreau, B. Bédard, and O. Simonin. A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas, 2005. 87, 215
- ALN Moreira, AS Moita, and MR Panão. Advances and challenges in explaining fuel spray impingement: How much of single droplet impact research is useful? *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(5):554–580, 2010. 33
- J.-B. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs - TH/CFD/05/74*. Phd thesis, INP Toulouse, 2005. 43, 68
- V. Moureau, P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. DNS analysis of a Re=40000 swirl burner. In NASA Ames/Stanford Univ. Center for Turbulence Research, editor, *Proceedings of the Summer Program*, pages 209–298, 2010. 37
- M. Nakamura, F. Akamatsu, R. Kurose, and M. Katsuki. Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Phys. Fluids*, 17:123301, 2005. 40
- A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combust. Flame*, 156(8):1627–1640, 2009. 40
- H. Nomura, Y. Ujiie, H. J. Rath, J. Sato, and M. Kono. Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. *Proc. Combust. Inst.*, 26:1267–1273, 1996. 79
- A.S. Novick and D.L. Troth. Low nox heavy fuel combustor concept. Technical Report NASA-CR °165367, NASA, October 1981. 34
- E. Olsson and G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *J. Comput. Phys.*, 210(1):225–246, 2005. 66, 90
- C. W. Oseen. *Hydrodynamik*. Leipzig, 1927. 69, 71
- Y. H. Pao. Structure of turbulent velocity and scalar fields at large wavenumbers. *Phys. Fluids*, 8:1063–1075, 1965. 146
- Y. H. Pao. Transfert of turbulent energy and scalar quantities at large wavenumbers. *Phys. Fluids*, 11:1371–1372, 1968. 146
- T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *J. Fluid Mech.*, 181:441–466, 1987. 145

- D. Paulhiac. *Simulations aux grandes échelles de la structure de flamme diphasique avec le formalisme Lagrangien*. PhD thesis, travaux en cours, INPT Toulouse, 2014. [88](#), [226](#)
- E. Peirano and B. Leckner. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 24:259–296, 1998. [163](#)
- N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001. [39](#)
- T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* , 101(1):104–129, 1992. doi: 10.1016/0021-9991(92)90046-2. [64](#), [111](#), [182](#)
- T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011. [16](#), [39](#), [60](#), [61](#)
- T. Poinso, S. Candel, and A. Trouvé. Application of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 21:531–576, 1996. [37](#)
- S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. [143](#)
- B. Prosperi, G. Delay, R. Bazile, J. Helie, and H. Nuglish. FPIV Study of gas entrainment by a hollow cone spray submitted to variable density. *Experiments in Fluids*, 43(2):315–327, 2007. [100](#)
- W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48(4):173, 1952. [75](#)
- Y. Renardy and Michael Renardy. A parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of Computational Physics*, (183):400–421, 2002. [66](#)
- J. Réveillon and F.-X. Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *J. Fluid Mech.* , 583:273–302, 2007. [39](#)
- J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion diagram. *Under consideration for publication in J. Fluid Mech.* , 2004. [41](#)
- J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* , 537:317–347, 2005. [15](#), [41](#), [42](#)
- J. Réveillon, K. N. C. Bray, and L. Vervisch. Dns study of spray vaporisation and turbulent micro-mixing, 1998. [38](#)
- A. M. Reynolds. The relative dispersion of particles in isotropic homogeneous turbulence. *Fluid Dynamics Research*, 16(1):1–10, 1995. [149](#)
- E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. [43](#), [62](#), [68](#), [85](#), [149](#)

- E. Riber, V. Moureau, M. García., T. Poinso, and O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. *J. Comput. Phys.* , 228:539–564, 2009. 87, 220
- L. F. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, Cambridge edition, 1922. 52, 143
- J. J. Riley and G. S. Paterson. Diffusion experiments with numerically integrated isotropic turbulence. *Phys. Fluids* , 17:292–297, 1974. 140
- N. K. Rizk and A. H. Lefebvre. Internal Flow Characteristics of simplex swirl atomizers. *J. Prop. Power* , 1(3):193–199, May-June 1985. 92
- A. Roux. *Simulation aux grandes échelles d'un statoréacteur*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, July 2009. 15, 38, 175
- A. Roux, S. Reichstadt, N. Bertier, L. Y. M. Gicquel, F. Vuillot, and T. Poinso. Comparison of numerical methods and combustion models for les of a ramjet. *C. R. Académie des SciencesMécanique* , 337(6-7):352–361, 2009. 175
- S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, and C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame* , 141:40–54, 2005. 61
- P.G. Saffmann. On the settling speed of free and fixed suspensions. *Studies in Applied Mathematics* , 52(2), 1973. 72, 73
- P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles*. Springer, mathématiques & applications edition, 1998. 54
- M. Sanjosé. *Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. PhD thesis, INP Toulouse, December 2009. 5, 17, 25, 43, 44, 78, 87, 88, 89, 93, 98, 101, 103, 105, 106, 107, 108, 175
- M. Sanjosé, J.M. Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinso. Fuel injection model for Euler-Euler and Euler-Lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *International Journal of multiphase flow* , 37:514–529, 2011. 16, 17, 68, 90, 93, 95, 96, 97, 106, 129, 133, 135, 213, 220
- Y. Sato, K. Hishida, and M. Maeda. Effect of dispersed phase on modification of turbulent flow in a wall jet. *Journal of Fluids Engineering* , 118:307–315, 1996. 74
- L. Schiller and A. Naumann. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung* , 77:318–320, 1935. 71
- P. Schmitt. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 64

- L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004. 61
- A. Sengissen, J. F. Van Kampen, R. Huls, G. Stoffels, J. B. W. Kok, and T. Poinso. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combust. Flame*, 150:40–53, 2007. 61
- J.-M. Senoner. *Simulation aux grandes échelles de l'écoulement diphasique évaporant dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange - TH/CFD/10/44*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse - Dynamique des Fluides, 2010. 15, 34, 43, 88, 93, 175
- J. A. Sethian and P. Smereka. Level set methods for fluid interfaces. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 35(1):341–372, 2003. 66, 90
- P. S. Sierra. *MODELING THE DISPERSION AND EVAPORATION OF SPRAYS IN AERONAUTICAL COMBUSTION CHAMBERS*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2012. 16, 44, 78, 79, 80, 86, 175, 183, 220, 245
- O. Simonin. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. In *Proc. 1st Int. Symp. Gas-Solid Flows*, pages 197–206. ASME, 1991. 67
- O. Simonin. Combustion and turbulence in two phase flows. *Von Karman Institute for Fluid Dynamics*, 31-32, 1996. 85
- O. Simonin. Gaz particules. Cours d'options, Ecole Nationale Supérieure d'Electrotechnique, d'Electronique, d'Informatique, d'Hydraulique et des Télécommunications., 2002. 67, 85
- Y. Simson. Simulation numérique d'un injecteur multipoint. Rapport de Projet de fin d'études CR/CFD/08/92, CERFACS, Septembre, 9 2008. 245
- W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. 79
- J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations: 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91:99–164, 1963. 54, 87
- W. H. Snyder and J. L. Lumley. Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 48(1):41–71, 1971. 140
- M. Sommerfeld. Validation of a stochastic lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *International Journal of multiphase flow*, 27(10):1829–1858, 2001. 149
- M. Sommerfeld and H. H. Qiu. Experimental studies of spray evaporation in turbulent flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 19:10–22, 1998. 38

- D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953. 74, 75
- K. D. Squires and J. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 226:1–35, 1991a. 74
- K. D. Squires and J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A*, 2(7):1191–1203, 1990. 149
- K. D. Squires and J. K. Eaton. Preferential concentration of particles by turbulence. *Phys. Fluids*, 3(5):1169–1178, 1991b. 38
- K. D. Squires and J. K. Eaton. Lagrangian and eulerian statistics obtained from direct numerical simulations of homogeneous turbulence. *Phys. Fluids A*, 3(1):130–143, 1991c. 140
- G. G. Stokes. On the effect of the inertial friction of fluids on the motions of pendulums. *Trans. Cambridge Phil. Soc.*, 9:8–23, 1851. 71
- R. Struijs. *A multi-dimensional upwind discretization method for the Euler equations on unstructured grids*. Phd thesis, Technical University of Delft, 1994. 175
- M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set method for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 114(1):146–159, 1994. 90
- Nicholas Syred. A review of oscillations mechanisms and the role of the precessing vortex core (pvc) in swirl combustion systems. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 32:93–161, 2006. 31
- Robert R. Tacina. Low nox potential of gas turbine engines. Technical report, NASA, January 1990. 34
- G.I. Taylor. The mechanics of swirl atomizer. In *7th Int. Cong. Appl. Mech.*, volume 2, pages 280–285, 1948. 93
- C.-M. Tchen. *Mean Value and Correlation Problems connected with the Motion of Small Particles suspended in a turbulent fluid*. Phd thesis, Technical University of Delft, Netherlands, 1947. 69, 140
- A.S Tomlin, T. Turanyi, and M. J. Pilling. *Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms*, volume Chapter 4. Elsevier, 1997. 57
- P. Trontin, S. Vincent, J.L. Estivalezes, and J.P. Caltagirone. A subgrid computation of the curvature by a particle/level-set method. application to a front-tracking/ghost-fluid method for incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, 2012. 66
- T. Turanyi. Reduction of large mechanisms. *New J. Chem.*, 14(1):795–803, 1990. 57

- A. Umemura. *Spray group combustion*, volume 299-313. in Nasser Ashgriz, 2011. [40](#)
- A. Umemura and Shoichi Takamori. Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray: A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism. *Combustion and Flame*, 141(4):336–349, 2005. [40](#)
- E. van Kalmthout and D. Veynante. Direct numerical simulation analysis of flame surface density models for non premixed turbulent combustion. *Phys. Fluids A*, 10(9):2347 – 2368, 1998. [60](#)
- L. Vervisch and T. Poinso. Direct numerical simulation of non premixed turbulent flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , 30:655–692, 1998. [37](#)
- L. Vervisch, E. Bidaux, K. N. C. Bray, and W. Kollmann. Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Phys. Fluids A*, 7(10):2496, 1995. [60](#)
- D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 28:193 – 266, 2002. [60](#)
- A. Vie. *Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2010. [68](#), [85](#), [175](#)
- A. Vié, L. Martinez, S. Jay, A. Benkenida, and B. Cuenot. Validation of the eulerian mesoscopic approach in particle-charged homogeneous isotropic decaying turbulence in the scope of large eddy simulation of fuel spray. In *ICLASS Proceedings*, number 090, Colorado, USA, July 2009. [38](#), [68](#)
- L.-P. Wang and M. R. Maxey. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* , 256:27–68, 1993. [149](#)
- L. P. Wang, A. S. Wexler, and Y. Zhou. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. *J. Fluid Mech.* , 415:117–153, 2000. [140](#)
- S. Wang, V. Yang, G. Hsiao, and H. Mongia. Large eddy simulation of gas turbine swirl injector flow dynamics. *Journal of Fluid Mechanics*, 583:99–122, 2007. [15](#), [32](#)
- H. G. Weller, C. J. Marooney, and A. D. Gosman. A new spectral method for calculation of the time-varying area of a laminar flame in homogeneous turbulence. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 629–636. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990. [61](#)
- S. Whitaker. *The method of volume averaging*. Kluwer Academic Publishers, 1999. [67](#)
- F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. [39](#)
- G. Winterfeld, H.E. Eickhoff, and K. Depooter. *Design of modern gas turbine combustors*, volume Chapter 3 of *SAN DIEGO*. 1990. [15](#), [32](#)

- D. Wunsch, R. Belt, P. Fede, and O. Simonin. Dns/dps of inertial droplet coalescence in homogeneous isotropic turbulence and comparison with pdf model predictions using the direct quadrature method of moments. *Proceedings of the ASME FEDSM 2009*, 2009. 68
- H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 27 – 34. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996. 200
- J.-T. Yang, A.-C. Chen, S.H.-Yang, and K.-J. Huang. Flow analysis of spray patterns of pressure-swirl micro atomizers. In *Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing*, volume 4052, National Tsing Hua University, 2003. 5, 17, 25, 89, 90, 91, 109, 110, 111, 114, 115
- A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids* , 29(7):2152–2164, 1986. 87
- D. Zhang and A. Prosperetti. Ensemble phase-averaged equations for bubbly flows. *Phys. Fluids* , 6(9):2956–2970, 1994. 79
- H. K. Zhao, T. Chan, B. Merriman, and S. Osher. A variational level set approach to multiphase motion. *J. Comput. Phys.* , 127(1):179–195, 1996. 66
- M. Zhu. Direct numerical simulation of laminar two-phase counterflow flames. Rapport de stage ingénieur 2eme année, Ecole Centrale de Pekin - CERFACS, 2010. 15, 34
- M. R. G. Zoby, S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and A. J. Marquis. Turbulent mixing in three-dimensional droplet arrays. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 32:499–509, 2011. 43
- D. Zuzio, J.L. Estivalezes, P. Villedieu, and G. Blanchard. Numerical simulation of primary and secondary atomization. In *3ème colloque INCA*, 2011. 90

Annexe A : Article from Flow, Turbulence and Combustion

L'annexe suivante est sous la forme d'un article soumis et accepté. Au départ, proposé dans le symposium méditerranéen MCS7 en Sardaigne, il a été accepté et finalement sélectionné pour être proposé et publié dans *Flow, Turbulence and Combustion*. Il se décompose en trois parties.

- La validation du modèle FIM-UR pour l'approche Eulérienne, relatif au chapitre 4.
- La validation d'un nouveau modèle d'évaporation, effectuée par [Sierra \(2012\)](#)
- L'application à la combustion diphasique dans le brûleur multipoint TLC, travail initié par [Lavedrine \(2008\)](#); [Simsont \(2008\)](#); [Jaegle \(2009\)](#); [Hannebique \(2009\)](#)

Le résumé est ici traduit en français:

Résumé

En raison de critère de compressibilité, le carburant des brûleurs aéronautiques est stocké sous forme liquide. Les simulations numériques induites dans de telles géométries requièrent donc des modèles pour la simulation des flammes diphasiques, mettant en jeu des phénomènes comme l'injection, l'atomisation, la polydispersion, la traînée, l'évaporation, et la combustion turbulente. Dans le travail ici présenté, des efforts particuliers de modélisation ont été mis en oeuvre sur l'injection du spray et l'évaporation, et leur couplage avec les modèles de combustion turbulente, dans une approche de type Simulations aux Grandes Échelles. Le modèle d'injection développé est validé grâce à des mesures expérimentales dans une configuration non évaporante avec atmosphère au repos, alors que le modèle d'évaporation est étudié dans le cas de gouttes isolées. L'ensemble des modèles est ensuite utilisé dans la simulation aux grandes échelles d'un brûleur multipoint en régime de décollage, exhibant ainsi la structure de flamme diphasique complexe.

Mots clés : Simulations aux Grandes Échelles, écoulement diphasique, évaporation, injection, combustion, injecteur multipoint.

Large Eddy Simulation of Reactive Two-Phase Flow in an Aeronautical Multipoint Burner

Gregory Hannebique · Patricia Sierra ·
Eleonore Riber · Bénédicte Cuenot

Received: 21 February 2012 / Accepted: 21 September 2012
© Springer Science+Business Media Dordrecht 2012

Abstract Because of compressibility criteria, fuel used in aeronautical combustors is liquid. Their numerical simulation therefore requires the modeling of two-phase flames, involving key phenomena such as injection, atomization, polydispersion, drag, evaporation and turbulent combustion. In the present work, particular modeling efforts have been made on spray injection and evaporation, and their coupling to turbulent combustion models in the Large Eddy Simulation (LES) approach. The model developed for fuel injection is validated against measurements in a non-evaporating spray in a quiescent atmosphere, while the evaporation model accuracy is discussed from results obtained in the case of evaporating isolated droplets. These models are finally used in reacting LES of a multipoint burner in take-off conditions, showing the complex two-phase flame structure.

Keywords Large Eddy Simulation · Two-phase flow · Evaporation · Injection · Combustion · Multipoint burner

1 Introduction

Large Eddy Simulation (LES) is a powerful tool to simulate industrial-scale burners and to understand complex unsteady phenomena such as combustion instabilities, ignition or quenching, giving access to the large scales structures and reducing the importance of modeling [1–6]. Since many combustion systems burn liquid fuel, extending LES to spray flames is crucial but still challenging, mainly because the physical submodels required to describe the atomization of a liquid fuel jet [7, 8], the dispersion of fuel droplet, their interaction with walls [9], evaporation [10] and combustion [11–15] are essentially subgrid phenomena. Direct simulation using interface tracking methods [16–18] is promising but still unaffordable in complex

G. Hannebique (✉) · P. Sierra · E. Riber · B. Cuenot
CERFACS, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France
e-mail: hannebiq@cerfacs.fr

geometries. Therefore, Euler–Euler and Euler–Lagrange approaches are widely used to perform LES in complex geometries [19–21].

The goal of this study is to present different models used to simulate liquid phase, and validate them against experiments. First, the liquid injection model is tested in a laminar case and compared to experiment. Then, a new evaporation model is described and validated in the configuration of a single isolated droplet evaporating in quiescent atmosphere. Finally, these models are used in a LES of a multipoint burner where the main phenomena to simulate a turbulent two phase flow flame are taken into account: injection, evaporation, turbulence and chemistry. The objective is to show the ability of the code to perform multiphysic simulations in complex geometries in critical conditions (take-off conditions), and to show the impact of liquid fuel on flame structure.

2 System Equations

2.1 Gas phase

The unstructured LES code AVBP explicitly solves the filtered compressible conservation equations for velocity u , total energy E and species mass fractions Y_k :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^{sgs}] + \bar{s}_{mo,i} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i (\bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij}) + \bar{q}_j + \bar{q}_j^{sgs}) + \bar{s}_{en} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{J}_{j,k} - \bar{J}_{j,k}^{sgs}) + \bar{s}_{ms,k} \quad \text{for } k = 1, N \quad (3)$$

where $\bar{\cdot}$ states for the Reynolds spatial filtering and $\tilde{\cdot}$ states for the Favre spatial filtering: $\bar{\rho} \tilde{f} = \bar{\rho} \tilde{f}$. Einstein's summation convention is applied over repeated indices and δ_{ij} denotes the Kronecker symbol. The inter-phase exchange terms of momentum, energy and mass respectively, \bar{s}_{mo} ; \bar{s}_{en} and $\bar{s}_{ms,k}$, are detailed in Section 2.3.2. $\bar{\tau}_{ij}$ stands for the laminar filtered stress tensor. The diffusive species flux $\bar{J}_{i,k}$ is evaluated with the Hirschfelder and Curtis approximation [22], a correction diffusion velocity V^c being added to ensure mass conservation [23]. The heat flux \bar{q}_j takes into account temperature diffusion as well as enthalpy flux due to differential species diffusion following Fouriers law. For the subgrid unclosed terms, the classical eddy-viscosity assumption is made:

$$\bar{\tau}_{ij}^{sgs} = \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \approx 2 \bar{\rho} \nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) \quad (4)$$

$$\bar{J}_{i,k}^{sgs} = - \bar{\rho} (\tilde{u}_j \tilde{Y}_k - \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) \approx - \bar{\rho} \left(D_t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_j} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (5)$$

$$\bar{q}_i^{sgs} = - \bar{\rho} (\tilde{u}_j \tilde{E} - \tilde{u}_j \tilde{E}) \approx - \lambda_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k}^{sgs} \tilde{h}_{s,k} \quad (6)$$

The turbulent viscosity is computed with the Wall Adapting Local Eddy-viscosity model [24], which recovers the right scaling of turbulent viscosity close to solid boundaries and yields reduced damping in zones of pure shear compared to the standard Smagorinsky model [25]. The turbulent diffusive coefficients D_t and λ_t are computed from the turbulent viscosity and the turbulent Schmidt and Prandtl numbers both equal to 0.6: $D_t = \mu_t / Sc_t$ and $\lambda_t = \bar{\rho} \nu_t \bar{C}_p / Pr_t$.

2.2 Dispersed liquid phase

The spray is here assumed diluted, which means that the maximum liquid volume fraction is low enough to neglect collisions. The droplets are much smaller than the LES filter width, allowing the point source approximation. Moreover, droplet deformation effects are small, motion due to shear is negligible and gravitational effects are not significant compared to drag.

The mesoscopic Eulerian approach used in this work describes the dispersed phase with ensemble average of the droplet properties over a given set of liquid-phase realizations, conditioned on one gas-phase realization and denoted $\check{\cdot} = \langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle_l$. The continuous averaged properties—also called mesoscopic quantities—are for a monodisperse evaporating spray: the droplet number density \check{n}_l , the liquid volume fraction $\check{\alpha}_l$, the velocity \check{u}_l and the enthalpy \check{h}_l . Each statistic droplet sample is described by a single diameter d defined by $\check{\alpha}_l = \check{n}_l \pi d^3 / 6$. With these definitions the discrete drop velocity u_p may be separated into an Eulerian part, the mesoscopic velocity \check{u}_l and a Lagrangian random part, the random uncorrelated velocity u_p'' [26]:

$$u_p = \check{u}_l + u_p'' \quad (7)$$

This random motion affects the distribution of droplets and is enhanced in zones of high shear and compressibility of the mesoscopic motion. This effect can be taken into account by solving a transport equation for the associated kinetic energy [27]. In this work however it is neglected, following the results of [28] where it was shown that neglecting random motion introduces error on fluctuations only, still leading to a correct prediction of the mean flow. By analogy with the gas phase Favre filtering, a LES filter is applied to the mesoscopic equations $\overline{\check{\alpha}_l \check{f}_l} = \bar{\alpha}_l \hat{f}_l$ where $\bar{\alpha}_l = \check{\alpha}_l$ is the spatially filtered liquid volume fraction. The subgrid velocity modelling accounts only for the mesoscopic motion. The final set of filtered equations for the dispersed phase is summarized below [29].

$$\frac{\partial \bar{n}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{n}_l \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\rho_l \partial \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = -\bar{\Gamma} \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = -\bar{F}_{d,i} - \hat{u}_{l,i} \bar{\Gamma} - \frac{\partial (-\bar{\tau}_{l,ij}^{sgs})}{\partial x_j} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{h}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,j} \hat{h}_l}{\partial x_j} = -\hat{h}_l \bar{\Gamma} + \bar{\Phi}_l \quad (11)$$

where the subgrid diffusion term of liquid enthalpy is neglected.

The filtered drag-force contribution is written \bar{F}_d , the filtered evaporation rate is denoted $\bar{\Gamma}$. $\bar{\Phi}_l$ is the filtered average of the conductive heat flux on the liquid side at the droplet surface. Details on the source terms are provided in Section 4. $\bar{\tau}_l^{sgs}$ is the droplet subgrid stress tensor, modeled by analogy to compressible single-phase flows, using a Smagorinsky formulation for the trace-free part together with a Yoshizawa formulation for the trace part [29]:

$$\bar{\tau}_{l,ij}^{sgs} = -\rho_l \bar{\alpha}_l \left(-C_s^2 \Delta^2 ||\hat{S}_l^*|| \hat{S}_{l,ij}^* + C_Y \Delta^2 ||\hat{S}_l^*||^2 \delta_{ij} \right) \quad (12)$$

$$\text{with: } \hat{S}_{l,ij}^* = \left(\frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \hat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (13)$$

$$||\hat{S}_l^*|| = \frac{1}{2} \hat{S}_{l,ij}^* \hat{S}_{l,ij}^* \quad (14)$$

2.3 Phase exchange terms

2.3.1 Drag force

Considering spherical droplets and high particle-to-fluid density ratio ($\rho/\rho_l \ll 1$) without gravity, the Stokes drag force is used with the correction of Schiller and Naumann [30], accounting for non zero relative velocity:

$$\bar{F}_{d,i} = \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\tau_p} (\hat{u}_{l,i} - \bar{u}_i) \text{ with: } \tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu} \frac{1}{1 + 0.15 Re_p^{0.687}} \quad (15)$$

where Re_p is the particle Reynolds number.

2.3.2 Evaporation and gaseous source terms

The evaporation model proposed in this work is detailed in Section 4. The source terms $\bar{s}_{mo,i}$, \bar{s}_{en} and $\bar{s}_{ms,k}$ in the gas phase in Eqs. 1, 2 and 3 are:

$$\bar{s}_{mo,i} = \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,i} - \bar{F}_{d,i} \quad (16)$$

$$\bar{s}_{en} = -\bar{\Phi}_l + \hat{h}_l \bar{\Gamma} + \bar{\Gamma} \left(\frac{1}{2} \hat{u}_{l,i}^2 \right) - \hat{u}_{l,i} \bar{F}_{d,i} \quad (17)$$

$$\bar{s}_{ms,k} = \bar{\Gamma} \delta_{kF} \quad (18)$$

2.4 Numerics

The gas and liquid flow equations are solved with an optimized Two-step Taylor-Galerkin scheme (TTGC) which achieves third order accuracy in time and space for convective terms [31]. Inlet and outlet boundary condition treatment use a one-dimensional formulation for non reflecting characteristic boundary conditions for viscous flows [32]. For liquid boundary conditions, Dirichlet conditions are used.

3 Liquid Injection Modeling Using the FIM-UR Approach

In many aeronautical burners, the spray is generated by an air-blast atomizer, and is the result of complex processes, initiated inside the injector itself and involving

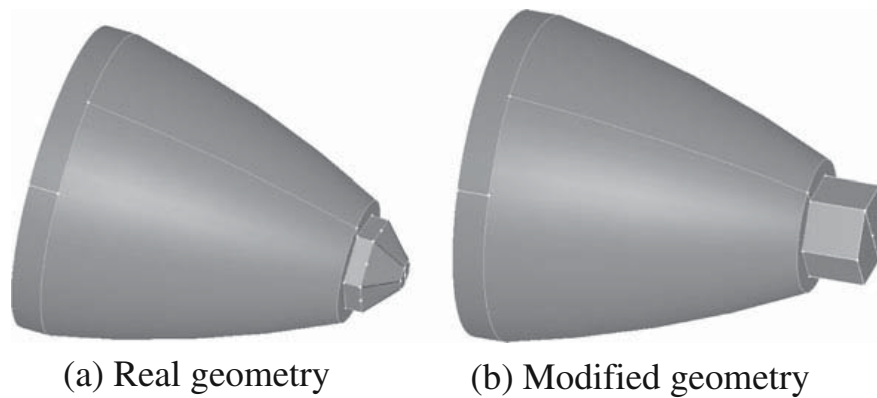
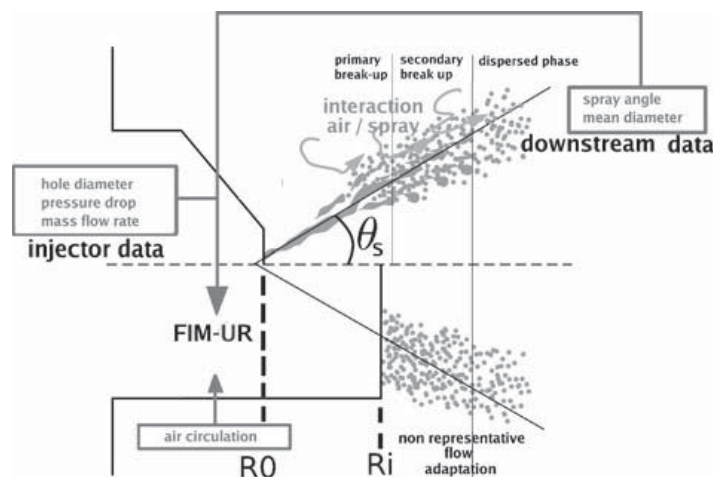


Fig. 1 Geometric modification implied by the FIM-UR model in the Eulerian approach for the dispersed phase

interaction with the air flow [33]. The liquid jet exiting from the injector is first submitted to strong shear from the air flow leading to primary atomization. In a second phase, secondary atomization occurs through interactions with the air and between droplets. In the same time, drag force and evaporation modify the gas flow and composition in the spray. Simulating primary atomization is a challenging and still open problem [16–18], which requires the description of liquid/gas interface, and is today out of reach in LES of complex two-phase reacting flows. The FIM-UR model (for **F**uel **I**njection **M**ethod by **U**pstream **R**econstruction) proposed in [21] circumvents the atomization issue by building from global and geometrical characteristics the profiles of the liquid volume fraction, gas and liquid velocity and droplet size at the close vicinity of the injector. This model was already successfully tested in a swirled turbulent configuration [21]. To better assess the accuracy of the model, it is here tested on the simple laminar configuration of [34], where the injection system is isolated from other physical phenomena. In particular the impact of injector geometry modification, consisting in increasing the injection surface to avoid high liquid volume fraction and stay in the dilute spray hypothesis (see Fig. 1), is evaluated.

Fig. 2 Principle of the FIM-UR model



The input parameters are the initial injection diameter ($2 * R_0$), the mass flow rate, the droplet mean diameter, the spray angle, and the modified geometry. Figure 2 gives a global picture of the model.

The principle of FIM-UR is to build profiles of the various spray quantities that allow to recover the correct flow downstream. At the real injection surface of radius R_0 , the axial liquid velocity is supposed uniform, the radial component is zero and the tangential component increases linearly from zero at the center to a maximum at the solid boundary of the injector, to mimic the rotation motion induced by this type of atomizer (Fig. 3a). This motion leads to the creation of an air core in the center of the injector, modeled here by a zero liquid volume fraction in this zone, while it is unity in the liquid sheet. As unity liquid volume fraction is not supported by

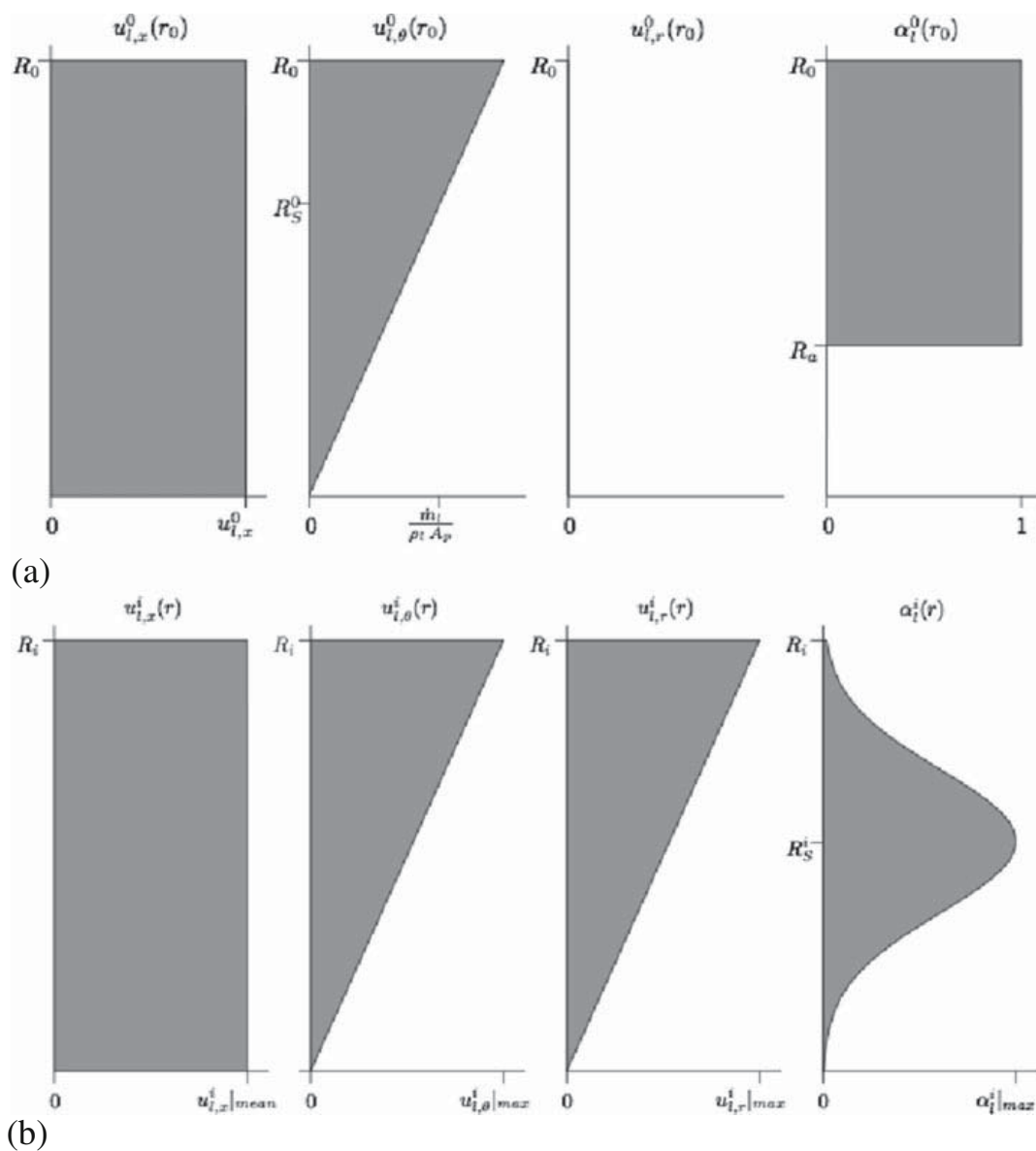


Fig. 3 Profiles of liquid axial, tangential, radial components of velocity, and liquid volume fraction: at the real injection plane (a), and at the numerical injection plane (b)

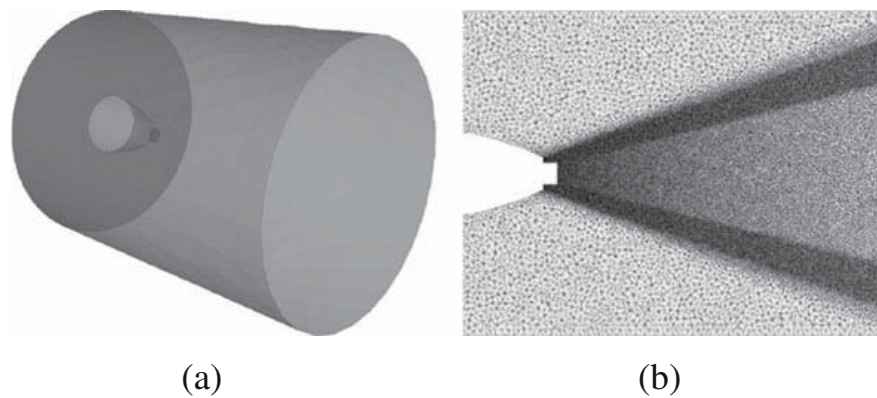


Fig. 4 Injection test case for FIM-UR **a** geometry **b** mesh

the two-phase flow model, the injection plane is enlarged to a radius R_i and moved downstream in the simulation, at a location where the liquid volume fraction has sufficiently decreased (Fig. 2). Applying momentum conservation and including the interaction with air, profiles at this numerical injection plane are derived: the radial component is here linear also, and a gaussian profile for the liquid volume fraction is used to represent the hollow cone shape of the spray (Fig. 3b).

The test configuration is a simple cylindrical chamber with a pressure-swirl Delavan atomizer injecting kerosene in a quiescent atmosphere. Initial gas and liquid temperatures are both 300 K. The spray is assumed monodisperse with a droplet mean diameter of 55 μm . The half-spray angle is 30°. The mass flow rate is 3 $\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$, and the orifice diameter R_0 is 0.5 mm. Figure 4a and b show the computational domain and a vertical mid-plane cut of the mesh, respectively. The mesh is composed of 3.5 million nodes and 20 million cells. 10 ms of physical time was simulated to reach a stationary flow, then averaging was done over 15 ms.

Figure 5 shows a qualitative comparison of the observed and computed sprays. The experimental direct visualization in Fig. 5a shows a half-spray angle of 30 degrees. This angle as well as the spray penetration are well reproduced in the computed spray, as shown in Fig. 5b. The hollow cone structure is also well reproduced.

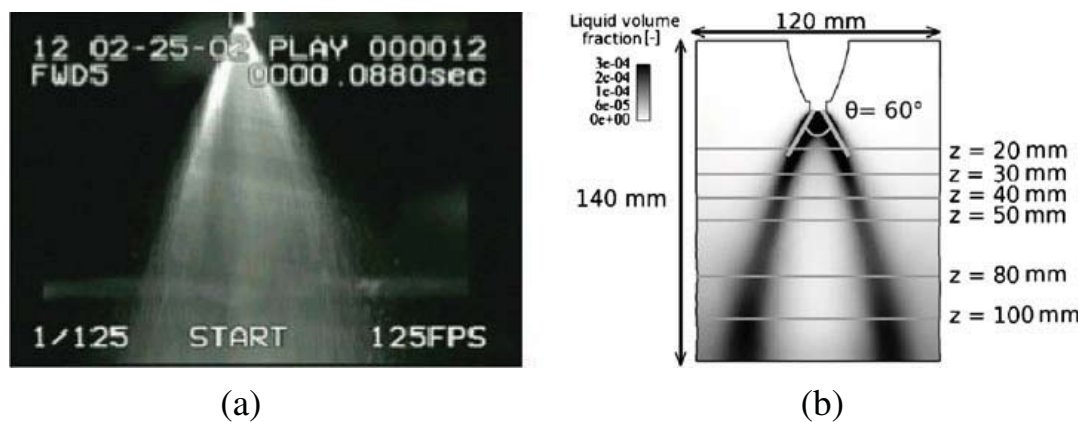
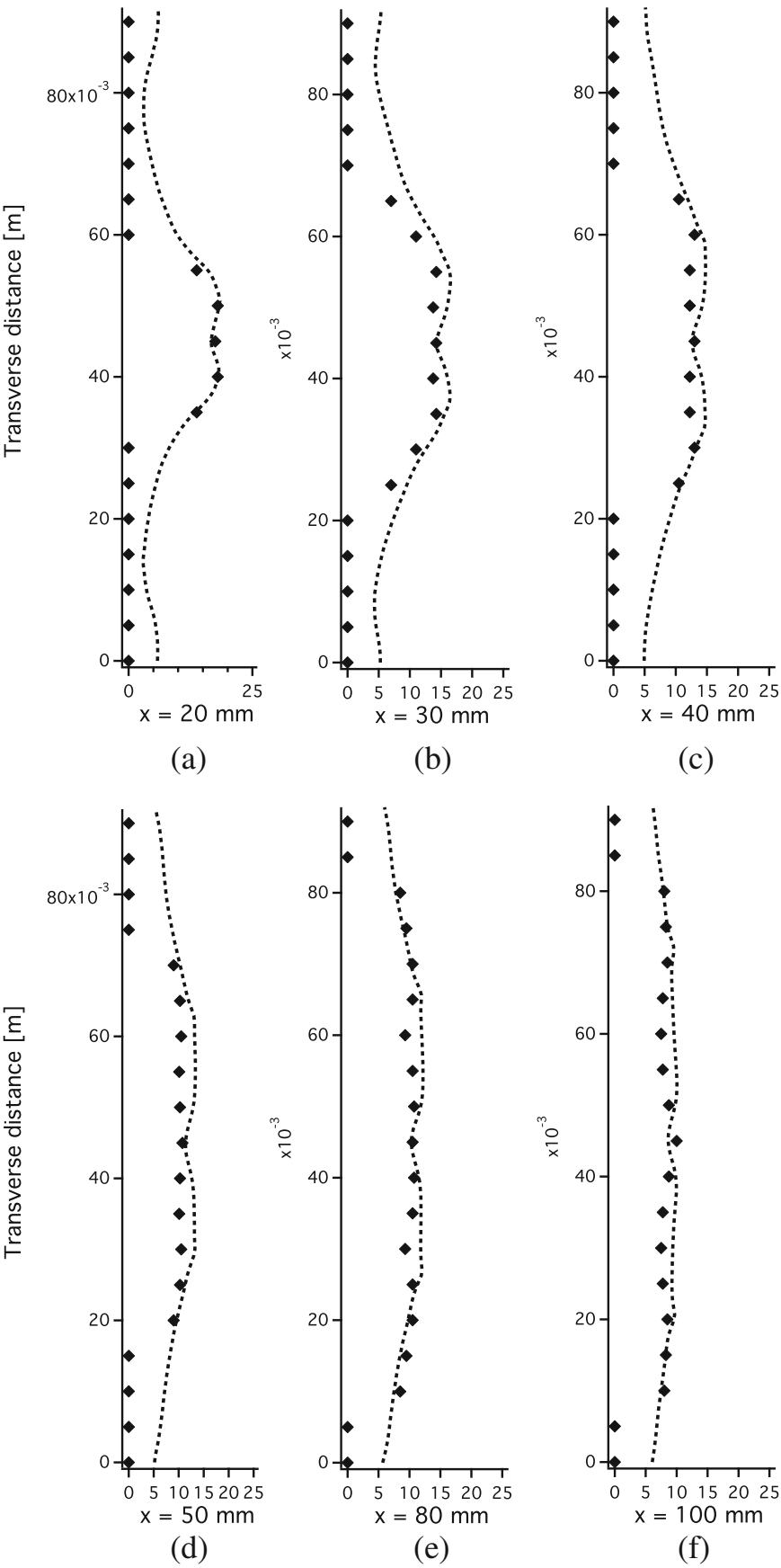


Fig. 5 Injection test case for FIM-UR: **a** experimental direct visualization **b** mean liquid volume fraction field in the mid-plane from simulation



◀ **Fig. 6** Injection test case for FIM-UR: radial profiles of mean liquid axial velocity at various stations downstream of the injector nozzle. Comparison between experiment (*black diamonds*) and simulation (*dashed lines*)

This indicates that the FIM-UR injection model correctly sets the liquid velocity and volume fraction and that the monodisperse assumption is acceptable in this case. To better assess the validity of the model, mean liquid axial velocity profiles obtained from the LES are compared to the measurements in Fig. 6 at various axial distances from the injector nozzle, indicated in Fig. 5b. The overall shape and level are in good agreement with the experimental results. Droplets are slowed by the gas phase, although far from the tip.

4 Evaporation Modeling

The evaporation model used in this work (referred hereafter as ‘AVBP-standard’) assumes infinite conduction in the liquid and spherical symmetry of the droplet. The gas is considered quasi-stationary, so that thermal and mass transfers in the gas phase only depend on the distance to the surface of the droplet [19]. Until recently, all experiments measuring the diameter temporal evolution of an evaporating isolated droplet were conducted with the droplet suspended on a support fiber to avoid the experimental difficulty of free-falling droplets [35]. Chauveau et al. [36] however proposed recently to use a novel cross micro-fiber system in order to reduce the diameter of the fiber and consequently the effect of heat conduction through the fiber, while keeping the spherical shape of the droplet. Repeating the experiment from the literature of a n-heptane droplet evaporating in a N_2 quiescent atmosphere, the evaporation time was almost doubled. In parallel, simulation of the same experiment by Sanjosé [37] showed that the evaporation process is strongly influenced by the modeling of the mixture thermodynamic properties at the droplet surface. Based on this last observation, a new evaporation model [38], referred hereafter as ‘AVBP-mix’ model, is proposed here and compared both to the ‘AVBP-standard’ model and to experiments [35, 36].

The Abramzon–Sirignano approach [39] is used to compute the mass transfer rate Γ and the heat transfer due to phase exchange, composed of two contributions, the conductive flux Φ_g and the enthalpy flux Λ_g :

$$\Gamma = -\pi d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M), \quad (19)$$

$$\Phi_g = -\pi d Nu \lambda (T_{\text{inf}} - T_l) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}, \quad (20)$$

$$\Lambda_g = \Gamma h_{s,F}(T_l), \quad (21)$$

In the above equations, Sh and Nu are respectively the Sherwood and the Nusselt numbers following the Ranz–Marshall correlations [40], D_F is the fuel diffusivity, $B_M = (Y_{F,\zeta} - Y_{F,\text{inf}}) / (1 - Y_{F,\zeta})$ is the Spalding mass number, $B_T = (1 + B_M)^\beta$ is the thermal Spalding number ($\beta = C_{p,F}/C_p \times Sh \cdot Pr / Nu \cdot Sc$, where $C_{p,F}$ stands for the gaseous fuel heat capacity, and C_p is the heat capacity of the mixture, and Pr and Sc are the mixture Prandtl and Schmidt numbers). Subscript ζ indicates droplet surface properties and $Y_{F,\zeta}$ is calculated using the Clausius–Clapeyron law.

Thermodynamic and transport properties are computed using the reference state corresponding to the 1/3 law [41] which assumes that the properties in the gaseous film surrounding the droplet follow a quasi-stationary evolution. The ‘AVBP-standard’ and ‘AVBP-mix’ models differ in the way these thermodynamic and transport properties are calculated. In the ‘AVBP-standard’ model, the mixture Prandtl and Schmidt numbers at the droplet surface are taken equal to those in the gas flow. Moreover, the product $[\rho D_F]$ is considered constant from the droplet surface to infinity and is written as:

$$[\rho D_F] = \frac{\mu(T_{\text{ref}})}{Sc_F}, \quad (22)$$

where Sc_F is the fuel Schmidt number, T_{ref} is the reference temperature and μ is the mixture viscosity. Note that assuming $[\rho D_F]$ and Sc_F constant leads to a dynamic viscosity $\nu = \mu/\rho$ proportional to T , which is close to classical power law for this quantity.

There are two improvements in the ‘AVBP-mix’ model. First, the Prandtl and Schmidt numbers of the mixture at the droplet surface are deduced from complex calculations using the CANTERA software [42], and are more realistic. Second, the mixture viscosity still evaluated at the reference temperature also depends now on mixture composition following the Wilke relation [43]:

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \Phi_{ij}}, \quad (23)$$

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_i}{W_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_i} \right)^{1/4} \right]^2, \quad (24)$$

where μ_i is the viscosity of species i in the gas mixture, fitted with power law of temperature on the CANTERA database.

The ‘AVBP-mix’ model is now close to the Chapman–Enskog kinetic theory of gases (used in CANTERA). the remaining differences are the species diffusion coefficients which depend on the binary diffusion coefficients, and the thermal conductivity of the mixture which is a combination of the thermal conductivity of each species in the mixture. To assess the accuracy of the ‘AVBP-mix’ evaporation model, comparison with the kinetic theory in academic configurations was performed. To do that, the LES code was coupled to CANTERA to build a third model called the ‘AVBP–CANTERA’ model, and used as reference.

Table 1 details the initial conditions for two cases of isolated droplet evaporating in a quiescent atmosphere. Case 1 corresponds to the academic case of [35] repeated in [36] whereas Case 2 corresponds to the evaporation conditions of a kerosene droplet outing from the pilot injection of the multipoint burner configuration

Table 1 Initial conditions for the simulation of isolated droplet evaporating in a quiescent atmosphere

	Fuel	Gas	Pressure [atm]	Gas temperature [K]	Droplet temperature [K]	Droplet diameter [μm]
Case 1	n-heptane	N ₂	1	623	300	500
Case 2	kerosene	air	19	728	300	10

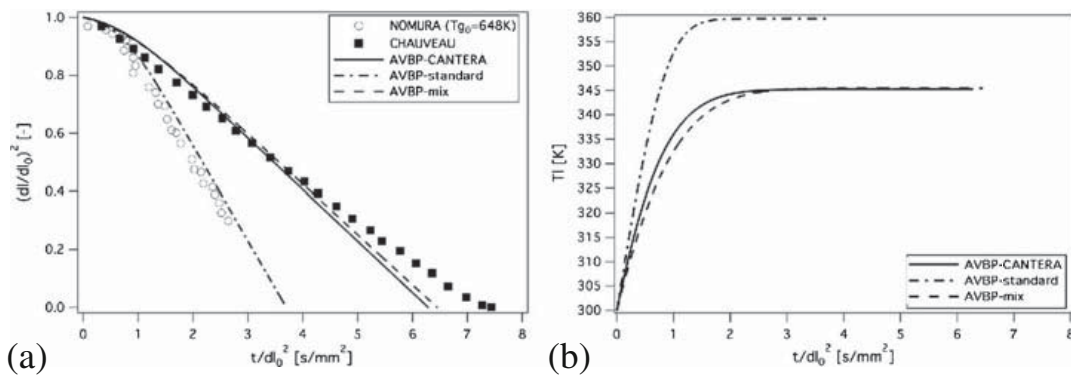


Fig. 7 Temporal evolution of squared droplet diameter **(a)** and liquid temperature **(b)** for Case 1 in Table 1. Comparison between measurements [35, 36] and simulations using ‘AVBP-standard’, ‘AVBP-mix’ and ‘AVBP-CANTERA’ models

presented in Section 5. Figure 7 shows the temporal evolution of the squared droplet diameter and temperature for Case 1, as obtained with the three models and compared to measurements (for diameter only). It clearly appears that the transport and thermodynamic properties used in the evaporation model considerably affect the evaporation time: ‘AVBP-mix’ doubles the evaporation time in comparison to ‘AVBP-standard’, and is close to the measurements of Chauveau et al. [36]. The comparison between ‘AVBP-mix’ and ‘AVBP-CANTERA’ shows that the modified mixture properties of ‘AVBP-mix’ are sufficient to correctly reproduce evaporation. In addition, the evaporation model has a non-negligible impact on the liquid temperature, as displayed in Fig. 7b. The same behaviour is observed for the droplet of kerosene in Case 2 (Fig. 8), for which the only available reference is the ‘AVBP-CANTERA’ result. Results show that the ‘AVBP-standard’ model still fails to predict both the evaporation time, and the equilibrium liquid temperature, whereas the new evaporation ‘AVBP-mix’ model performs well on both quantities and appears sufficiently accurate to be applied to a real combustor.

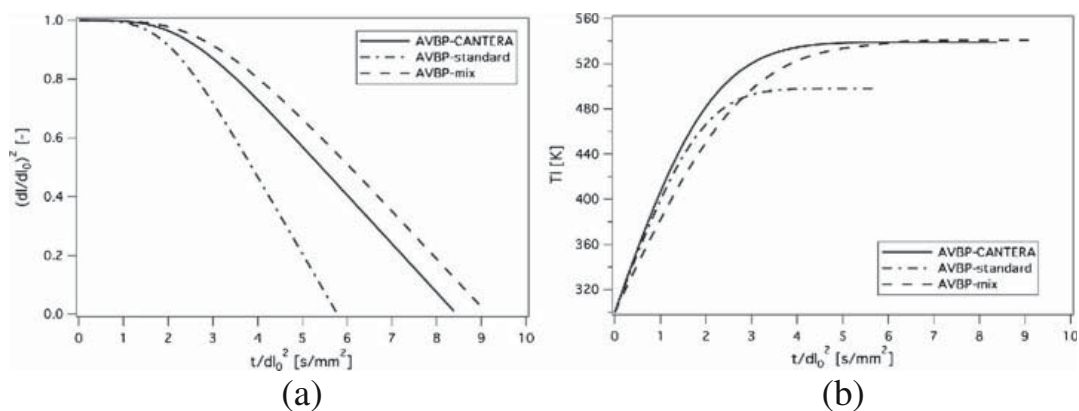


Fig. 8 Temporal evolution of squared droplet diameter **(a)** and liquid temperature **(b)** for Case 2 in Table 1. Comparison between simulations using ‘AVBP-standard’, ‘AVBP-mix’ and ‘AVBP-CANTERA’ models

5 Application to the Multipoint Injection Burner

The multipoint injection burner was set-up in the framework of the TLC (Towards Lean Combustion) European Project and is representative of a real industrial burner, where liquid fuel is injected by both a pilot and a series of liquid jets distributed around it, while air is swirled through a complex premixing swirler. The computational domain shown in Fig. 9 includes a multipoint injection system, a plenum for air supply, a chamber and an exit nozzle.

Details of the pilot and the multipoint fuel injectors are provided in Fig. 10a. The pilot fuel atomizer is of the piezo-type, and a series of 24 holes of diameter 0.5 mm, located around the inner wall of the main stage forms the multipoint injector. The fuel distribution among the two systems depends on the operation regime. The premixing swirler has three stages as shown in Fig. 10b. All stages are counter-rotating relative to each other, which increases the turbulent mixing in the areas where the different flows meet. Approximately 90 % of the total air goes through the main swirler stage. The remaining 10 % is split between the inner (3 %) and the outer pilot swirlers (7 %). Multiperforated walls are used to provide cooling air to the chamber. At the choked exit nozzle, supersonic flow conditions lead to acoustically non-reflecting outflow boundary condition.

The computed operating point corresponds to take-off conditions (full thrust), where both fuel injectors are fed with kerosene at temperature $T_l = 300$ K. Droplets with a diameter of $10\text{ }\mu\text{m}$ and a half spray angle of 30° are injected at the pilot injector nozzle using the FIM-UR model and account for 15 % of total injected kerosene, whereas droplets with a diameter of $30\text{ }\mu\text{m}$ are injected perpendicularly to the hole surface of the multipoint injector. Air is injected at temperature $T_g = 728$ K. The fuel/air ratio corresponds to a global equivalence ratio of 0.44. The chamber pressure is 19.5 bars.

The simulation was performed using the unstructured mesh illustrated in Fig. 11, composed of about 23.5 million cells and 4.2 million nodes. It is strongly refined in the mixing and reactive zones, around the swirlers and the injection systems. The same models and boundary conditions as for the laminar liquid injection simulation are used. Moreover, the 2S_KERO_BFER two-step reduced scheme for kerosene-air flames [44] is used. It accounts for a kerosene oxidation reaction and the CO-CO₂ equilibrium, and has been fitted against experimental data and detailed mechanisms to reproduce correctly the laminar flame speed and the burnt gas temperature over a wide range of pressure, temperature and equivalence ratio. The Dynamic Thickening flame model [45] is used to model flame-turbulence interactions.



Fig. 9 Computational domain for the multipoint injection burner

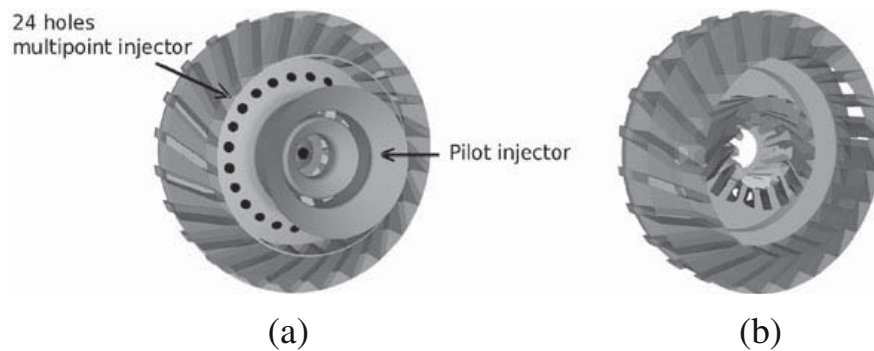


Fig. 10 Close view of the two injection systems **a** and the three swirler stages **b**

5.1 Results—cold flow

Figure 12a shows the gas mean axial velocity field in a vertical cut plane of the combustion chamber. Under the effect of swirl, the flow opens largely when entering the chamber and different recirculation zones appear: a central toroidal recirculation zone occupies a large volume of the chamber and enters into the diffuser of the injection system. Corner recirculation zones also develop in the upstream corners of the chamber. Strong shear layers appear in the regions where the flows issuing from the different stages meet, as shown by the gas fluctuating (RMS) axial velocity field in Fig. 12b. In these zones, the turbulence intensity reaches 25 %, leading to strong mixing. Validation of LES in the same geometry but for a smaller chamber pressure ($P = 4.37$ bars) was proposed in [46] by comparison with experiment.

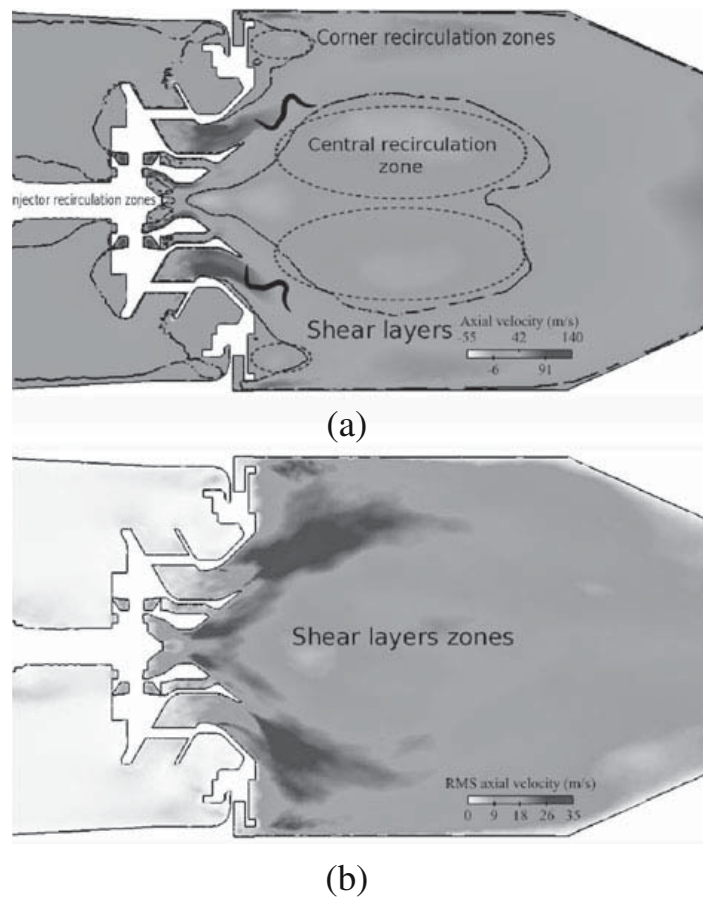
5.2 Results—reactive case

A global picture of the two-phase flame is given in Fig. 13 with the mean liquid volume fraction field and an isoline of heat release. It clearly shows how the liquid kerosene enters the chamber through both injection lines, follows the opening air flow and evaporates upstream and inside the flame front. A conical flame is obtained, stabilized by both injections and extending around the recirculation zone, in the high shear region. This flame produces hot gases at a temperature close to 2600 K (corresponding to the stoichiometric burnt gas temperature) that fill the central recirculation zone (Fig. 13b). These gases do not mix immediately with the surrounding cold flow, resulting in a quite inhomogeneous temperature distribution in the first half of the chamber. Mixing is however almost complete in the second half of the chamber, resulting in a significant decrease of the temperature at the chamber exit. Figure 13b also shows that in the second half of the chamber, *i.e.* in a well mixed region, the computed mean temperature profile is relatively flat, with a mean value

Fig. 11 Vertical mid-plane cut of the mesh used for the multipoint injection configuration



Fig. 12 Flow topology in the multipoint injection burner. **a** Mean gas axial velocity field in the vertical cut plane, with the zero-axial gas velocity isoline (*black line*). **b** RMS gas axial velocity field in the vertical cut plane



($T_{\text{mean}} = 1796\text{K}$) almost equal to the burnt gas temperature at the global equivalence ratio of the simulation ($T_{BG} = 1793\text{K}$) as expected.

The local flame structure depends on the spray dispersion and evaporation, resulting in a non-homogeneous field of kerosene vapor which in turn mixes with the ambient air. Figure 14a shows an instantaneous field of fuel vapor, together with an isoline of evaporation mass transfer (in grey) and an isoline of heat release (in black). Evaporation mainly occurs in the fresh gases close to the injector exit. In the present operation conditions, saturation is reached rapidly in the evaporating pilot spray and the time needed to evaporate all the liquid is about 1 ms, while the convective time needed to reach the flame is much smaller (0.225 ms). In addition, most of the droplets issued from the pilot are stopped by the central recirculation zone, where the flame stabilizes, and complete their evaporation there. As a consequence, evaporation also occurs in the flame and in the burnt gases. This is not the case for the droplets injected through the multipoint injector: even if saturation is reached rapidly next to injection, the liquid volume fraction decreases enough to enable evaporation, with a characteristic evaporation time close to 0.6 ms which is smaller than the convective time 0.7 ms. This leads to a complex flame structure, as will be seen later.

The liquid injections result then in a partially premixed flame, experiencing variable equivalence ratio. The small droplets issued from the central pilot evaporate fast enough to create a rich premixed flame in the close vicinity of the injector,

producing burnt gases without oxygen. The remaining droplets go through the flame, accumulate and evaporate just behind, leading to a high fuel vapor concentration in this region which mixes with the oxygen-free burnt gases. The liquid injected by the multipoint system being more diluted when reaching the flame, gives smaller equivalence ratio. The resulting field of mixture fraction Z is shown in Fig. 14c where isolines of temperature are superimposed. Note that Z is based on the C atom as:

$$Z = \frac{Y_C - Y_C^O}{Y_C^F - Y_C^O}, \quad (25)$$

where Y_C is the mass fraction of the C atom, and the superscripts O and F refer to the pure oxidizer and pure fuel streams respectively. In the present case, $Y_C^O = 0$ and the mixture fraction reduces to $Z = Y_C/Y_C^F$, varying from 0 in pure air to 1 in pure kerosene. The stoichiometric value is $Z_{st} = 0.0625$. As diluted kerosene sprays are injected in the present configuration, the liquid volume fraction, even at the injector, stays far from unity. As a consequence, the maximum value of Z obtained in the calculation does not exceed 0.2. The mixture fraction gradually increases from the injectors downstream of the flame, and continues to increase in the burnt gases behind the flame in the tip region of the central recirculation zone, while it stays close to stoichiometry or below in the rest of the chamber, where it finally goes back to the global value of 0.02625. Interestingly, the flame follows the stoichiometric isoline as long as it exists in the fresh reactants. This is the consequence of the variable

Fig. 13 Multipoint injection burner: **a** Mean liquid volume fraction field in the vertical mid-plane cut, with mean heat release isoline (black line, value 4.6×10^9 J/m³/s). **b** Mean gas temperature in the vertical mid-plane cut with radial profile of mean temperature compared to the burnt gas temperature at global equivalence ratio $\phi = 0.44$

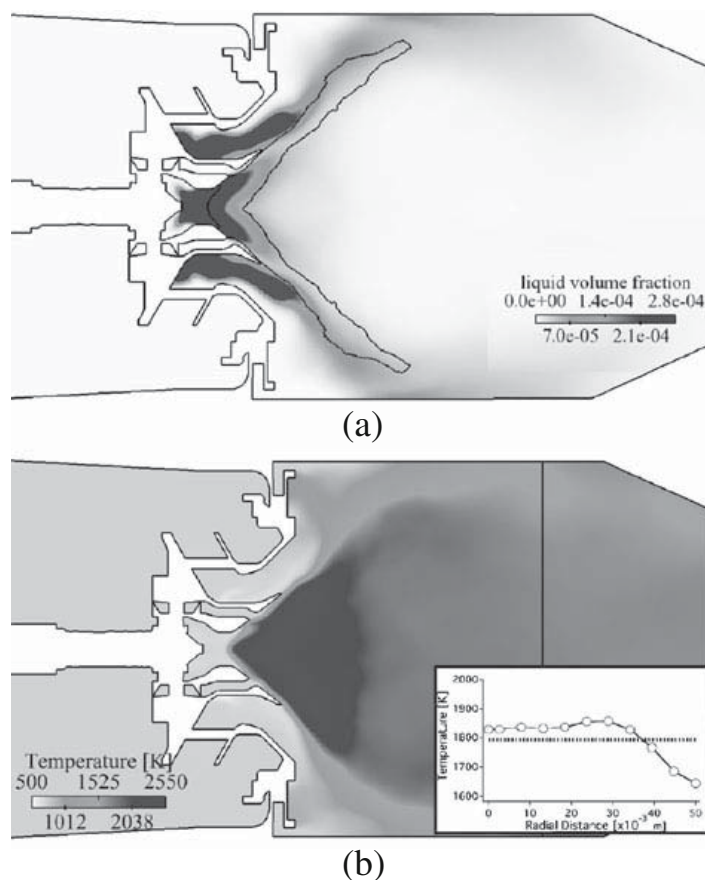
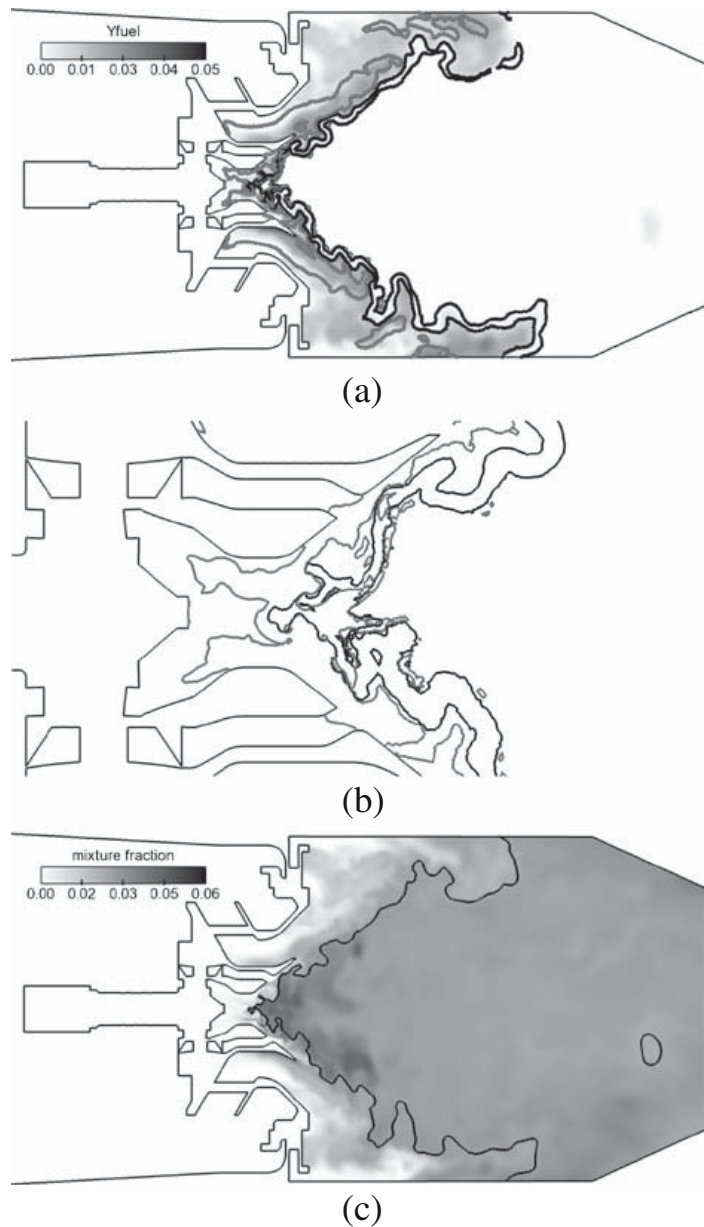


Fig. 14 Multipoint injection burner: **a** Instantaneous fuel vapor field in the vertical mid-plane cut, with isolines of heat release (*black line*) and evaporation mass transfer (*grey line*), **b** Zoom on the zone next to the injector, **c** Instantaneous mixture fraction field in the vertical mid-plane cut, with black isoline of temperature $T = 1500\text{K}$



equivalence ratio through the flame, due to evaporation, and leading to a maximum heat release at stoichiometry. Note also that the downstream parts of the flame front burn at an equivalence ratio close to the lean flammability limit ($\phi = 0.4$).

To understand the flame structure, the Takeno index [47] was calculated to identify the local combustion regimes. As a reminder, Takeno index is defined as:

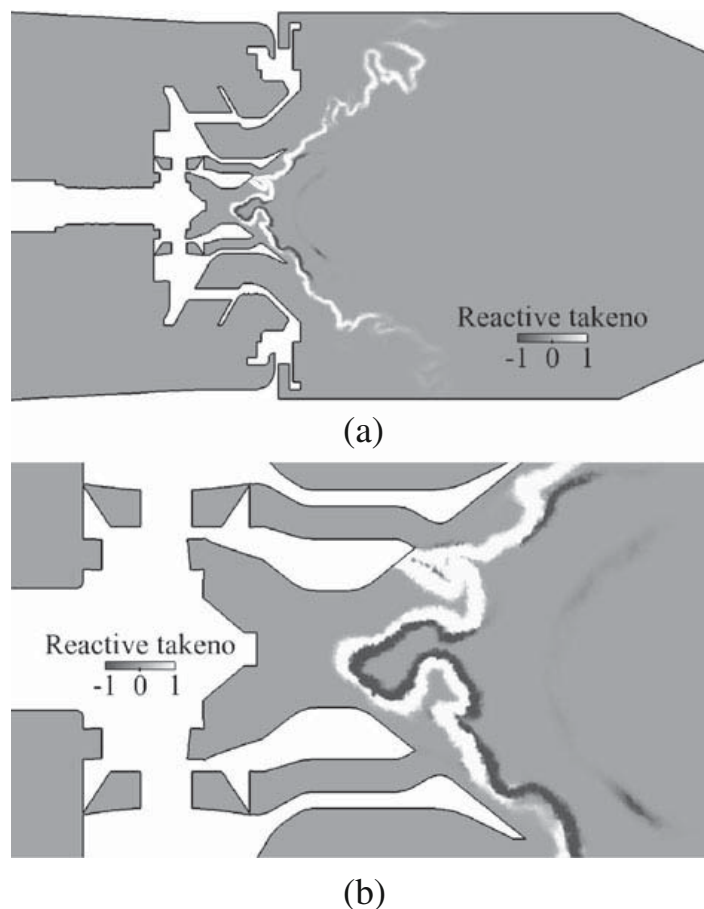
$$\text{Takeno} = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O \quad (26)$$

where Y_F is the mass fraction of fuel and Y_O is the mass fraction of oxydizer. Such a product of gradients enable to characterize combustion regimes: positive values indicate premixed regime, while negative values are found for diffusion flames. The Takeno index is then normalized to be 1 in premixed flames and -1 in diffusion

flames, and is conditioned on the reaction zone. Results are displayed in Fig. 15. They reveal a diffusion flame downstream of the main premixed flame, which was too weak to be visible in the previous pictures. This flame is the result of the burning of the very rich, oxygen-free burnt gas pocket generated by the pilot spray evaporation, with the oxygen remaining in the burnt gases and possibly coming from the external swirler stage, in a fully non-premixed regime. Otherwise the whole flame is premixed, with variable equivalence ratio. A particular structure is also revealed by the change of sign of the Takeno index in the burnt side of the flame: this is due to the change of sign of the fuel vapor gradient, which increases again under the effect of spray evaporation. In this zone, although the Takeno index is negative, the combustion regime is still premixed, with a variable equivalence ratio across the flame.

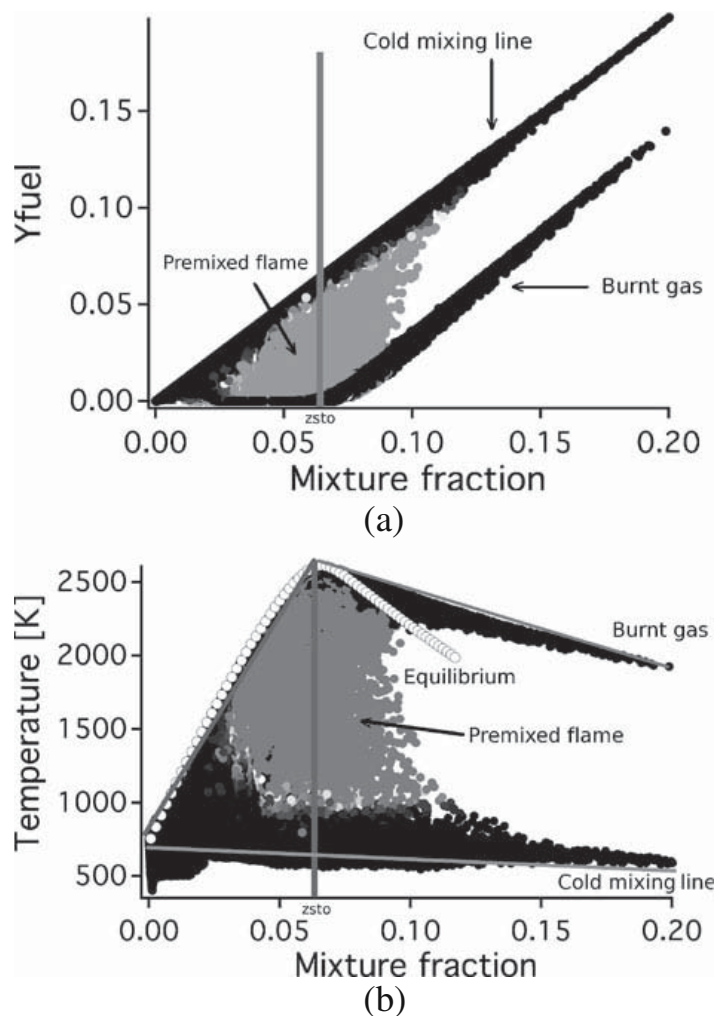
This particular structure is characterized in Fig. 16a and b with scatterplots of fuel vapor and temperature versus mixture fraction respectively. Dots are colored by the Takeno index, and in Fig. 16b, the chemical equilibrium solution for purely gaseous mixtures is plotted with white symbols as a reference. In both figures, classical limits are found and are drawn with lines. The first one corresponds to the non-reacting mixing of air at 728K with fuel vapor at the equilibrium temperature 560K, and is described by the line $Y_F = Z$ in Fig. 16a and the bottom line in Fig. 16b. Note that some temperatures lie below this bottom line as the injected air is slightly cooled by the evaporation process in the unburnt mixture. The second limit describes fully

Fig. 15 Multipoint injection burner: **a** Instantaneous field of normalized and reaction-conditioned Takeno index. **b** Zoom on the injection region



burnt gases, and is materialized by the bottom lines in Fig. 16a and upper lines in Fig. 16b. In the fuel mass fraction scatter plot of Fig. 16a, this limit corresponds to the infinitely fast chemistry, diffusion flame structure between pure air and fuel diluted in burnt gases, i.e. two line portions joining at the stoichiometric point. However in the temperature scatter plot of Fig. 16b, this diffusion flame structure lies above the gaseous equilibrium temperature on the rich side. This might be surprising as one would expect that the introduction of liquid fuel would lower the maximum temperature due to evaporation. In fact it describes the secondary purely diffusion flame revealed by the Takeno index, that occurs in burnt gas and is fed by the evaporation of fuel droplets in this region. As a consequence, on the rich side, the mixture fraction increases without significant change of the temperature, moving burnt gas points towards richer mixtures. These fuel-enriched mixture then burns with oxydizer in a purely diffusion flame, creating the upper limit of Fig. 16b. Between the non reacting and diffusion flame limits, a large region is filled with grey dots corresponding to the premixed flame with varying equivalence ratio. A small zone just above the non-reacting mixing line is filled with dark points, representing the pre-heating and mixing with burnt gases of the non-homogeneous mixture of air

Fig. 16 Multipoint injection burner: scatter plots of **a** the fuel vapor mass fraction, and **b** the gas temperature versus mixture fraction, colored by the Takeno index (*grey dots*: positive Takeno index; *black dots*: negative Takeno index). *White symbols* represent chemical equilibrium of gaseous mixtures



and kerosene vapor just in front of the flame. The premixed flame burns locally in the mixture fraction range $Z \in [0.03; 0.1]$, i.e. $\phi \in [0.5; 1.5]$, higher than the global equivalence ratio of 0.44 and around stoichiometry. This demonstrates that the multipoint injection burner allows to stabilize a flame even at a very lean global equivalence ratio, which is the main objective of such design. The pilot injector plays a crucial role in this process, as it generates a very energetic flame and a hot gas pocket in the central recirculation zone, which in turn anchors the flame issued from the multipoint injection. Results of this section show the ability of our models to perform fully turbulent reactive two phase flows in complex geometries, and the analysis of physics linked to these phenomena.

6 Conclusions

LES was performed in a complex aeronautical burner dedicated to lean spray combustion which presents a complex injection system made of three air swirler stages and two liquid kerosene injections, a pilot injector and a multipoint system. The mesoscopic Euler approach developed in the AVBP compressible solver was used. The combustion of kerosene was modeled by a two-step reduced scheme and the interaction with turbulence was accounted for using the Thickened Flame model. Injection and evaporation being key phenomena, their modeling was first validated by comparison with experiments in academic configurations. The FIM-UR method was used to reproduce experiments of liquid kerosene injection through a pressure swirl atomizer. An improvement of the classical Abramzon–Sirignano evaporation model was proposed to account for the dependence of mixture thermodynamical properties on composition, and then tested in the reference experiment of an evaporating isolated n-heptane droplet. Both models showed good agreement with experiment and were then used for the two-phase reacting simulation of a multipoint injection burner. Despite its limitations and still many open modeling issues, LES and models defining injection and evaporation were able to reproduce the crucial role of the pilot injection to stabilise a flame despite the very lean global equivalence ratio. The flame structure analysis showed new behaviours compared to gas flames, mainly due to evaporation: non adiabaticity, change in equivalence ratio across the flame front, diffusion flame far downstream of the premixed flame due to a very rich, oxygen-free burnt gas pocket generated by the pilot spray. Obviously, some models such as injection must be improved, and more quantitative comparisons with experiment, together with LES using an Euler–Lagrange approach, are required to improve the analysis of the burner performances.

Acknowledgement Part of this research project has been supported by the European Community under contract number 210781-2 within the Marie Curie Initial Training Network of the 7th Framework Programme.

References

1. Yuan, L.L., Street, R.L., Ferziger, J.H.: Large-eddy simulations of a round jet in crossflow. *J. Fluid Mech.* **379**, 71–104 (1999)
2. Yang, K.S., Ferziger, J.H.: Large-eddy simulation of turbulent obstacle flow using a dynamic subgrid-scale model. *AIAA J.* **31**(8), 1406–1413 (1993)

3. Verzicco, R., Mohd-Yusof, J., Orlandi, P., Haworth, D.: Large Eddy Simulation in complex geometric configurations using boundary body forces. *AIAA J.* **38**(3), 427–433 (2000)
4. Riley, J.: Review of Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent combustion. *J. Fluids Eng.* **128**(2), 209–215 (2006)
5. Murota, T., Ohtsuka, M.: Large-Eddy Simulations of combustion oscillation in premixed combustor. In: International Gas Turbine and Aeroengine Congress & Exposition, ASME Paper, vol. 99-GT-274 (1999)
6. Itoh, Y., Taniguchi, N., Kobayashi, T., Tominaga, T.: Large Eddy Simulation of spray combustion in swirling flows. In: ASME FEDSM, Honolulu, Hawaii, USA (2003)
7. Giffen, E., Muraszew, A.: Atomization of Liquid Fuels. Chapman & Hall, London (1953)
8. Spalding, D.B.: The combustion of liquid fuels. In: 4th Symp. (Int.) on Combustion, pp. 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh (1953)
9. Desoutter, G., Cuenot, B., Habchi, C., Poinso, T.: Interaction of a premixed flame with a liquid fuel film on a wall. *Proc. Combust. Inst.* **30**, 259–267 (2005)
10. Brandt, M., Gugel, K.O., Hassa, C.: Experimental investigation of the liquid fuel evaporation in a premix duct for lean premixed and prevaporized combustion. *J. Eng. Gas. Turbul. Power* **119**, 815–821 (1997)
11. Caraeni, D., Bergstrom, C., Fuchs, L.: Modeling of liquid fuel injection, evaporation and mixing in a gas turbine burner using large eddy simulation. *Flow Turbul. Combust.* **65**, 223–244 (2000)
12. Chiu, H.H., Croke, E.J.: Group combustion of liquid fuel sprays. *Energy Technology Lab* 81–2. University of Illinois, Chicago (1981)
13. Nakamura, M., Akamatsu, F., Kurose, R., Katsuki, M.: Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Phys. Fluids* **17**, 123301 (2005)
14. Sornek, R.J., Dobashi, R., Hirano, T.: Effect of turbulence on vaporization, mixing, and combustion of liquid-fuel sprays. *Combust. Flame* **120**(4), 479–491 (2000)
15. Imaoka, R.T., Sirignano, W.A.: A generalized analysis for liquid-fuel vaporization and burning. *Int. J. Heat Mass Transfer* **48**, 4342–4353 (2005)
16. Menard, T., Tanguy, S., Berlemont, A.: Coupling level set/vof/ghost fluid methods: validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *Int. J. Multiphase Flow* **33**, 510–524 (2007)
17. Fuster, D., Bagué, A., Boeck, T., Moynea, L.L., Leboissetier, A., Popinet, S., Raya, P., Scardovelli, R., Zaleski, S.: Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *Int. J. Multiphase Flow* **35**, 550–565 (2009)
18. Zuzio, D., Estivalezes, J.: An efficient block parallel AMR method for two phase interfacial flow simulations. *Comput. Fluids* **44**, 339–357 (2011)
19. Boileau, M., Pascaud, S., Riber, E., Cuenot, B., Gicquel, L., Poinso, T., Cazalens, M.: Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in gas turbines. *Flow Turbul. Combust.* **80**(3), 291–321 (2008)
20. Apte, S., Mahesh, K., Moin, P.: Large-eddy simulation of evaporating spray in a coaxial combustor. *Proc. Combust. Inst.* **32**(2), 2247–2256 (2009)
21. Sanjosé, M., Senoner, J., Jaegle, F., Cuenot, B., Moreau, S., Poinso, T.: Fuel injection model for Euler–Euler and Euler–Lagrange Large-Eddy Simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *Int. J. Multiphase Flow* **37**, 514–529 (2011)
22. Hirschfelder, J.O., Curtiss, F., Bird, R.B.: Molecular Theory of Gases and Liquids. Wiley (1964)
23. Poinso, T., Veynante, D.: Theoretical and Numerical Combustion. R.T. Edwards (2001)
24. Ducros, F., Ferrand, V., Nicoud, F., Weber, C., Darracq, D., Gacherrieu, C., Poinso, T.: Large-eddy simulation of shock-turbulence interaction. *J. Comput. Phys.* **152**, 517–549 (1999)
25. Smagorinsky, J.: General circulation experiments with the primitive equations: 1. The basic experiment. *Mon. Weather Rev.* **91**, 99–164 (1963)
26. Février, P., Simonin, O., Squires, K.: Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.* **533**, 1–46 (2005)
27. Simonin, O.: Gaz particules, Cours d’options, Ecole Nationale Supérieure d’Electrotechnique, d’Electronique, d’Informatique, d’Hydraulique et des Télécommunications (2002)
28. Riber, E., Moureau, V., García, M., Poinso, T., Simonin, O.: Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. *J. Comput. Phys.* **228**, 539–564 (2009)
29. Moreau, M., Simonin, O., Bédard, B.: Development of gas-particle Euler–Euler LES approach: a priori analysis of particle sub-grid models in homogeneous isotropic turbulence. *Flow Turbul. Combust.* **84**, 295–324 (2010)
30. Schiller, L., Nauman, A.: A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung* **77**, 318–320 (1935)

31. Colin, O., Rudgyard, M.: Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.* **162**(2), 338–371 (2000)
32. Poinso, T., Lele, S.: Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* **101**(1), 104–129 (1992)
33. Lefebvre, A.H.: Atomization and sprays. In: *Combustion*. Hemisphere Publishing/Taylor & Francis (1989)
34. Yang, J.T., Chen, A.C., Yang, S.H., Huang, K.J.: Flow analysis of spray patterns of pressure-swirl micro atomizers. In: *Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing*, vol. 4052. National Tsing Hua University (2003)
35. Nomura, H., Ujiie, Y., Rath, H.J., Sato, J., Kono, M.: Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. *Proc. Combust. Inst.* **26**, 1267–1273 (1996)
36. Chauveau, C., Halter, F., Lalonde, A., Gokalp, I.: An experimental study on the droplet vaporization: effects of heat conduction through the support fiber. In: *ILASS*, 4-1. Como Lake, Italy (2008)
37. Sanjosé, M.: Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide, Ph.D. thesis, INP Toulouse (2009)
38. Sierra, P.S.: Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers. Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse (2012)
39. Abramzon, B., Sirignano, W.A.: Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer* **9**, 1605–1618 (1989)
40. Ranz, W.E., Marshall, W.R.: Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.* **48**(4), 173 (1952)
41. Hubbard, G.L., Denny, V.E., Mills, A.F.: Droplet evaporation: effects of transient and variable properties. *Int. J. Heat Mass Transfer* **18**, 1003–1008 (1975)
42. Goodwin, D.G.: Cantera C++ Users Guide. <http://sourceforge.net/projects/cantera>. Version 1.80 (01 01 2011) (2002). Accessed 1 Jan 2011
43. Bird, R.B., Stewart, W.E., Lighfoot, E.N.: *Transport Phenomena*. Wiley, New York (1960)
44. Franzelli, B., Riber, E., Sanjosé, M., Poinso, T.: A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combust. Flame* **157**(7), 1364–1373 (2010)
45. Colin, O., Ducros, F., Veynante, D., Poinso, T.: A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* **12**(7), 1843–1863 (2000)
46. Jaegle, F., Senoner, J.M., Garcia, M., Bismes, F., Lecourt, R., Cuenot, B., Poinso, T.: Lagrangian and eulerian simulations of evaporating fuel spray in an aeronautical multipoint injector. *Proc. Combust. Inst.* **33**, 2099–2107 (2011)
47. Yamashita, H., Shimada, M., Takeno, T.: A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. In: *26th Symp. Int. on Combustion*, pp. 27–34. The Combustion Institute, Pittsburgh (1996)

Annexe B : MERCATO : Champs supplémentaires

La Figure 41 présente des champs instantanés de température liquide, de diamètre de gouttes, de température gazeuse et de fraction massique de carburant dans le plan médian pour le cas ELD_{32} .

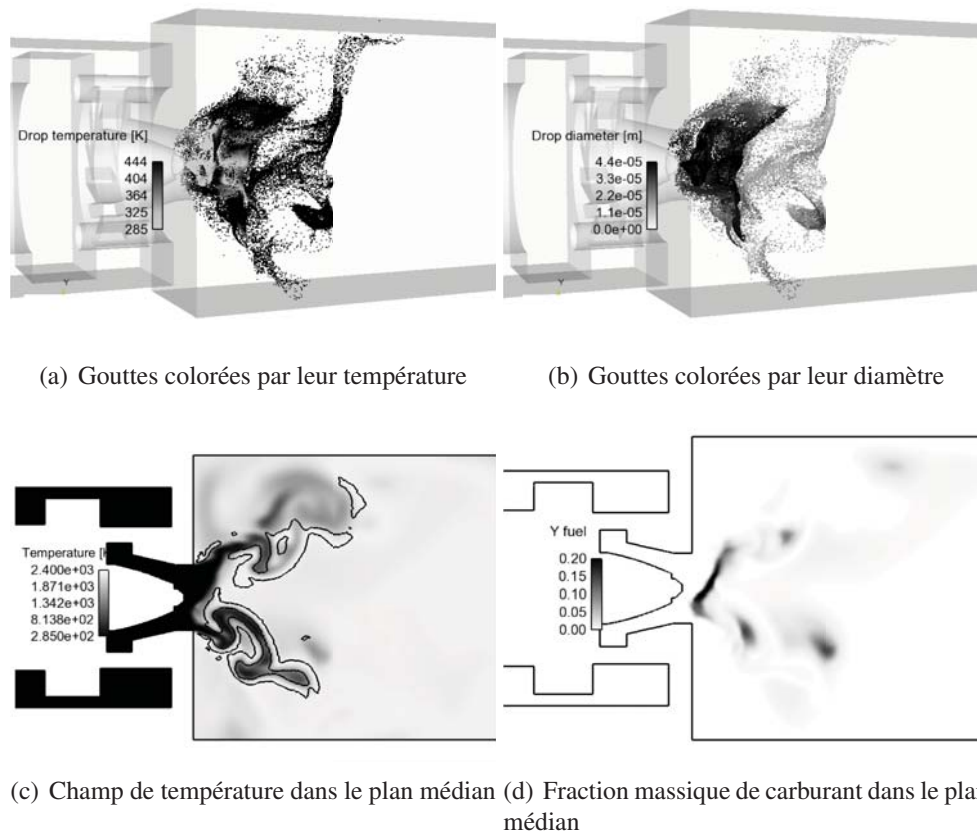


Figure 41: Champs instantanés de particules colorés (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas ELD_{32}

La Figure 42 présente des champs instantanés d'indice Takeno réactif, de gouttes, de fraction massique de kérosène gazeux et de fraction massique de dioxygène dans le plan médian pour le cas ELD_{32} .

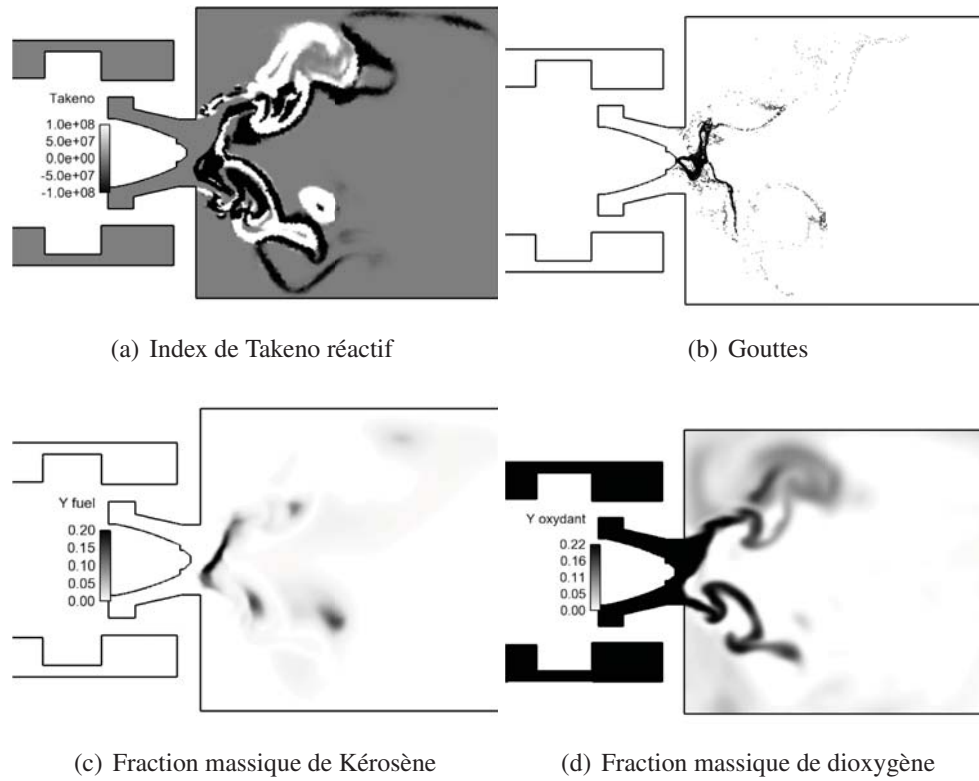


Figure 42: Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux (d) dans le plan médian. Cas ELD_{32}

La Figure 43 présente des champs instantanés de température liquide, de diamètre de gouttes, de température gazeuse et de fraction massique de carburant dans le plan médian pour le cas *ELRR*.

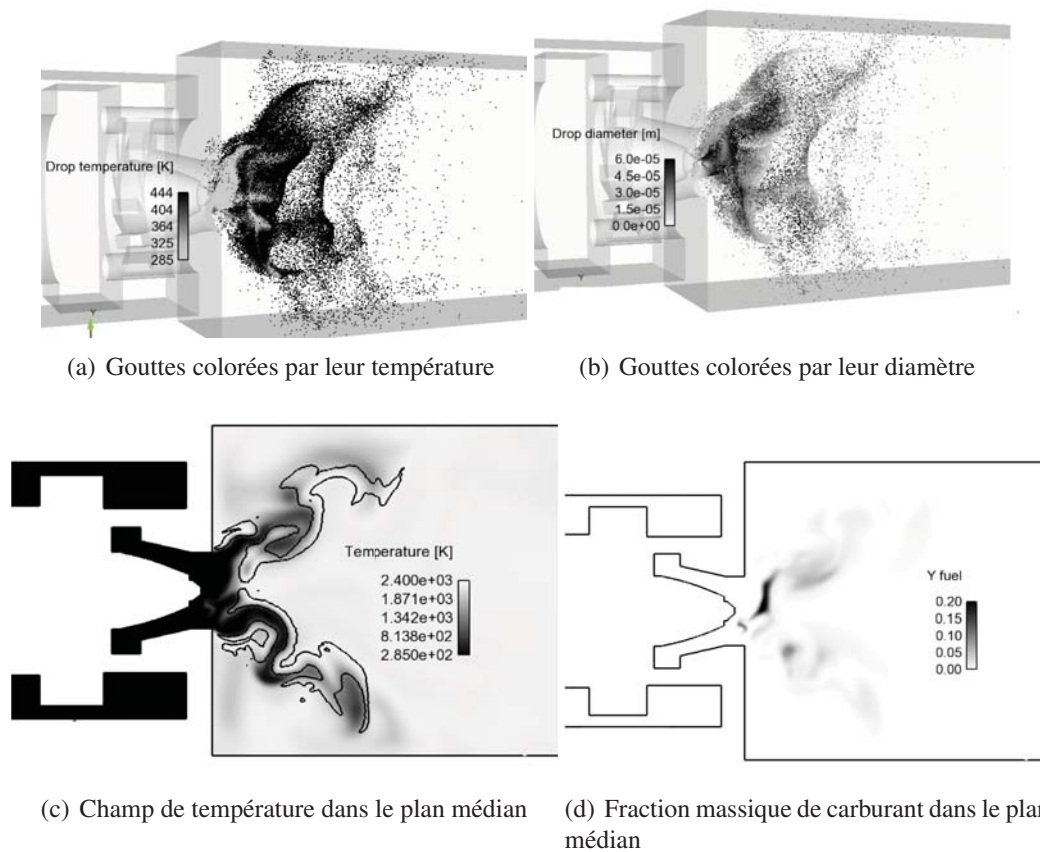


Figure 43: Champs instantanés de gouttes colorées par leur température (a) ; gouttes colorées par leur diamètre (b) et température gazeuse avec isoligne de dégagement de chaleur (c) ; champ de fraction massique de kérosène gazeux (d) dans le plan médian. Cas *ELRR*

La Figure 44 présente des champs instantanés d'indice Takeno réactif, de gouttes, de fraction massique de kérosène gazeux et de fraction massique de dioxygène dans le plan médian pour le cas *ELRR*.

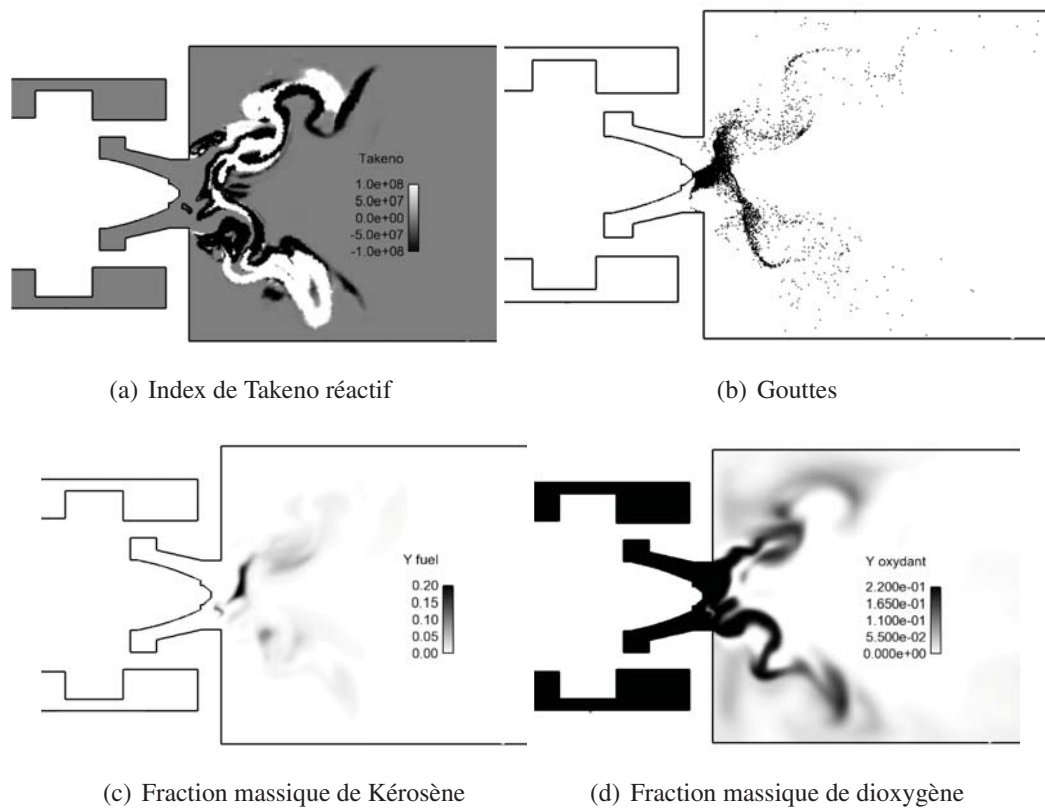


Figure 44: Champs instantanés de Takeno (a), de gouttes (b), de fraction massique de kérosène (c) et de température (d) dans le plan médian . Cas *ELRR*